

# THESE de DOCTORAT de l'UNIVERSITE PARIS XI

Spécialité : Physique des Solides

présentée par  
**Franck SELVA**

pour obtenir le grade de  
**Docteur en sciences de l'Université Paris XI Orsay**

---

Formation d'une molécule de Wigner sur un réseau  
bidimensionnel : Structure et aimantation.

---

soutenue le 24 juin 2002 devant la commission d'examen composée de :

*Rapporteurs*

**Rodolfo Jalabert**

**Dima Shepelyansky**

*Examineurs*

**Oriol Bohigas**

**Thierry Giamarchi**

**Thierry Jolicœur**

*Directeur de thèse*

**Jean-Louis Pichard**

Service de Physique de l'Etat condensé CEA-Saclay DSM/DRECAM



# Remerciements

---

Ce travail de thèse a été effectué au Service de Physique de l'Etat Condensé du CEA-Saclay. Je voudrais tout d'abord remercier Jean-Louis Pichard, non seulement pour m'avoir guidé dans mon travail au cours de ces années, mais aussi pour avoir su maintenir enthousiasme et bonhomie au sein du groupe, malgré la difficulté des sujets abordés.

Je remercie Oriol Bohigas, Thierry Giamarchi et Thierry Jolicœur d'avoir accepté de faire partie de mon jury. Moults remerciements à Rodolfo Jalabert et Dima Shepelyansky qui ont eu la lourde tâche de rédiger un rapport sur le manuscrit.

Amateur d'expresso, Giuliano Benenti m'a mis le pied à l'étrier. Je le remercie aussi pour son indéfectible sens de l'humour et pour sa grande humanité. Gert Ingold m'a aussi beaucoup aidé à mes débuts, notamment en me faisant réécrire mon programme en Fortran 90, je le remercie également pour m'avoir fait découvrir la beauté des Alpes allemandes.

J'ai eu le plaisir de collaborer avec Dietmar Weinmann à Augsburg et à Strasbourg. Sa rigueur au travail m'aura beaucoup appris. Merci aussi de m'avoir accueilli dans ta famille : je sais désormais qu'il ne faut pas tremper le bretzel dans le café.

Je remercie aussi les personnes avec qui je n'ai pas travaillé, mais qui étaient présentes au quotidien. Notamment mes camarades (de galère) thésards : Valentin Rodriguez, qui comme moi est passé du côté obscur (et qui ne restera mon ami que si je deviens riche), je le remercie également pour sa connaissance encyclopédique des rues de Prague ; Fabien Portier pour ses histoires lubriques mêlant étroitement plantigrades polaires et autres phoques des banquises ; Ronald dont le flegme nous rappelait que (même au bout du rouleau qui est au bord du gouffre) tout n'était pas perdu pour nous, mais aussi tous les autres : Sophie Djordjevic, Frédéric Pierre, Anne Anthore, Laure-Hélène Bize et j'en oublie. Il y a aussi ceux qui ont partagé mon bureau : l'escaladeur des plus hauts pics terrestres et aussi jeune mentor en physique Xavier Waintal ; l'archiprêtre Renaud Leturcq : nos débats houleux n'effacent pas le fait que tu es très serviable et que je reste donc ton débiteur ; et enfin Patrice Roche qui, pour nous soutenir, passe de temps en temps nous raconter de bonnes blagues dans notre bureau.

Je remercie mes amis qui m'ont supporté sans faille, aussi bien aux soleils d'Austerlitz qu'aux soirées Waterloo : Eric, Laurent, Jeff, Arno, Quitterie, Sophie, Elisabeth, le ZELVINO IMPERATOR et j'en oublie...

Je remercie mes parents qui ont su me laisser faire des erreurs, sans me priver de leur soutien. Je remercie enfin ma soeur Selvi, sans qui cette thèse n'aurait pas eu lieu et qui, même si cela n'est pas son rôle, palie aux déficiences de l'Etat en acceptant avec philosophie notre co-location.



# Table des matières

---

|  |               |
|--|---------------|
| <b>Remerciements</b>   | <b>2</b>      |
| <b>Table des matières</b>  | <b>4</b>      |
| <b>Liste des Figures</b>   | <b>7</b>      |
| <b>Préambule</b>   | <b>12</b>     |
| <br><b>I Introduction</b>  | <br><b>15</b> |
| <b>1 Gaz de particules en interaction de basse dimension</b>                   | <b>17</b>     |
| 1.1 Présentation du problème . . . . .   | 17            |
| 1.1.1 La densité comme mesure de la force des interactions : $r_s$ : . . . . . | 18            |
| 1.1.2 Diagramme de phase attendu à 2d . . . . .                                | 19            |
| 1.2 La limite de basses densités : $r_s \gg 1$ . . . . .                       | 21            |
| 1.2.1 Le Cristal de Wigner . . . . .   | 21            |
| 1.2.2 La fusion du cristal de Wigner . . . . .                                 | 23            |
| 1.3 La limite de hautes densités : $r_s < 1$ . . . . .                         | 28            |
| 1.3.1 Liquide de Fermi . . . . .   | 28            |
| 1.3.2 Les longueurs du problème . . . . .                                      | 29            |
| 1.3.3 Effet du désordre . . . . .  | 31            |
| 1.3.4 Différentes formes possibles d'un diagramme de phase . . . . .           | 34            |
| 1.4 Magnétismes d'un gaz de particules . . . . .                               | 35            |
| 1.4.1 Magnétisme de spins - Couplage à un champs magnétique parallèle . .      | 35            |
| 1.4.2 Magnétisme orbital - Courants Permanents . . . . .                       | 40            |
| 1.4.3 Conclusion . . . . .   | 45            |

|           |   |           |
|-----------|---|-----------|
| <b>2</b>  | <b>Expériences dans des gaz bidimensionnels dilués</b>                          | <b>47</b> |
| 2.1       | Présentation des différents systèmes expérimentaux . . . . .                    | 47        |
| 2.2       | La transition métal-isolant en dimension deux . . . . .                         | 48        |
| 2.2.1     | Les mesures de résistivité . . . . .  | 49        |
| 2.2.2     | Les autres mesures - nature de la phase isolante . . . . .                      | 52        |
| 2.3       | Effet d'un champ magnétique sur la TMI - magnétisme du gaz . . . . .            | 53        |
| 2.3.1     | Effet sur la TMI d'un champ magnétique . . . . .                                | 54        |
| 2.3.2     | Magnétisme . . . . .  | 55        |
| 2.4       | Les propositions théoriques - Question sur un diagramme de phase possible . . . | 56        |
| <b>3</b>  | <b>Une approche sur réseau</b>  | <b>59</b> |
| 3.1       | Le modèle sur réseau . . . . .  | 59        |
| 3.1.1     | Taille finie et conditions de bords . . . . .                                   | 61        |
| 3.2       | Liens avec les paramètres du modèle continu . . . . .                           | 61        |
| 3.2.1     | Correspondances entre modèle continu et discret . . . . .                       | 61        |
| 3.2.2     | La force des interactions $r_s$ . . . . .                                       | 62        |
| 3.2.3     | Une mesure du désordre $k_{fl}$ . . . . .                                       | 63        |
| 3.3       | Grandeurs reliées à la localisation . . . . .                                   | 63        |
| 3.4       | Méthode numérique . . . . .   | 67        |
| <b>II</b> | <b>Systèmes bidimensionnels de petites tailles sur réseau</b>                   | <b>71</b> |
| <b>4</b>  | <b>Théorie de perturbation dans la limite du cristal de Wigner</b>              | <b>73</b> |
| 4.1       | Développement de l'énergie sur réseau . . . . .                                 | 73        |
| 4.1.1     | Développement de l'énergie fondamentale à l'ordre $n$ . . . . .                 | 74        |
| 4.1.2     | Effet d'un désordre faible . . . . .  | 75        |
| 4.2       | Calculs des courants permanents dans la limite de forte interaction . . . . .   | 77        |
| 4.2.1     | Calcul du courant permanent longitudinal . . . . .                              | 78        |
| 4.2.2     | Courants transverses . . . . .  | 85        |
| 4.3       | Hamiltonien effectif de spin sur réseau . . . . .                               | 87        |
| 4.3.1     | Calcul perturbatif du hamiltonien effectif . . . . .                            | 87        |
| 4.3.2     | Courants permanents à 1D pour un nombre pair de particules avec spin            | 89        |
| 4.4       | Limites thermodynamique et continue . . . . .                                   | 91        |
| 4.5       | Conclusion . . . . .  | 92        |
| <b>5</b>  | <b>Etude numérique sur réseau de fermions avec spins</b>                        | <b>95</b> |
| 5.1       | Les électrons sur un réseau bidimensionnel . . . . .                            | 95        |
| 5.1.1     | Hamiltonien des particules avec spins et sans champ magnétique . . . . .        | 96        |
| 5.1.2     | Effet d'un champ magnétique parallèle . . . . .                                 | 97        |
| 5.2       | Etude numérique de 4 fermions de spin 1/2 dans un réseau $6 \times 6$ . . . . . | 98        |
| 5.2.1     | Energies de polarisation : $\Delta_1$ ; $\Delta_2$ . . . . .                    | 98        |
| 5.2.2     | Magnétisme spontané . . . . .   | 101       |

|            |  |            |
|------------|--|------------|
| 5.2.3      | Evolution de la délocalisation sous champ magnétique . . . . .                                       | 102        |
| 5.3        | Conclusions . . . . .  | 104        |
| <b>6</b>   | <b>Etude de la cristallisation dans un système de petite taille</b>                                  | <b>105</b> |
| 6.1        | Signature spectrale d'une transition pour des fermions sans spin . . . . .                           | 105        |
| 6.1.1      | Limite du régime de Fermi $r_s^f$ . . . . .  | 105        |
| 6.1.2      | Evolution de $r_s^f$ avec le désordre . . . . .  | 107        |
| 6.2        | Structure du régime intermédiaire . . . . .  | 108        |
| 6.2.1      | Etude des distances entre particules . . . . .   | 108        |
| 6.2.2      | Etude des projections à désordre nul sur les ondes planes et les cristaux déformés . . . . .         | 111        |
| 6.2.3      | Conclusion . . . . .   | 114        |
| <b>III</b> | <b>Effet de la portée des interactions à une dimension</b>   | <b>117</b> |
| <b>7</b>   | <b>Présentation du modèle de deux particules en dimension un</b>                                     | <b>119</b> |
| 7.1        | Modèle TIP . . . . .   | 119        |
| 7.1.1      | Le hamiltonien TIP . . . . .   | 119        |
| 7.1.2      | Réécriture du hamiltonien dans la base sans interaction . . . . .                                    | 120        |
| 7.1.3      | Délocalisation induite par les interactions . . . . .  | 120        |
| 7.2        | Spectre de deux particules . . . . .   | 121        |
| 7.2.1      | La limite sans interaction : états 2FP . . . . .   | 121        |
| 7.2.2      | La limite de forte interaction : états moléculaires . . . . .  | 122        |
| <b>8</b>   | <b>Comparaison par étude numérique des interactions d'Hubbard et de Coulomb</b>                      | <b>125</b> |
| 8.1        | Mélange des états à un corps . . . . .   | 125        |
| 8.1.1      | Eléments de matrice d'interaction . . . . .  | 125        |
| 8.1.2      | Signatures de la différence de densité des états couplés $\rho_2$ entre Hubbard et Coulomb . . . . . | 128        |
| 8.2        | Propriété spectrale et délocalisation spatiale . . . . .   | 130        |
| 8.2.1      | Bases préférentielles. . . . .   | 131        |
| 8.2.2      | Statistique de niveaux . . . . .   | 132        |
| 8.2.3      | Délocalisation . . . . .   | 137        |
| 8.3        | Conclusions . . . . .  | 137        |
|            | <b>Conclusion générale</b>   | <b>139</b> |
|            | <b>Liste des publications</b>  | <b>141</b> |
|            | <b>Bibliographie</b>   | <b>142</b> |





# Table des figures

---

|      |   |    |
|------|---|----|
| 1.1  | distance moyenne $b$ entre particules et volume moyen de confinement. . . . .   | 18 |
| 1.2  | Figure de gauche : Energie par particule $E_0^F$ et $E_0^W$ en trait plein et leurs extrapolations en pointillé montrant une transition entre les phases hautes et basses densités. Figure de droite : Diagramme de phase attendu pour un gaz bidimensionnel avec ( $V \neq 0$ ) et sans désordre ( $V = 0$ ) . . . . . | 20 |
| 1.3  | Réseau hexagonal du cristal de Wigner à 2d . . . . .  | 21 |
| 1.4  | Figure tirée de la référence [143]. L'énergie du fondamental $E(r_s, \xi)$ pour différentes polarisations $\xi$ : fluide non-polarisé(tirets), fluide totalement polarisé(pointillés) et phase solide(trait plein). $c_1$ est la constante de Madelung. . .   | 25 |
| 1.5  | Défauts topologiques : dislocations . . . . .   | 26 |
| 1.6  | Diagramme de phase de la fusion classique . . . . .   | 27 |
| 1.7  | Fonction d'échelle $\beta(g)$ . . . . .   | 33 |
| 1.8  | Diagramme de phase température-densité . . . . .  | 35 |
| 1.9  | Effet de la parité . . . . .  | 36 |
| 1.10 | Instabilité de Stoner . . . . .   | 38 |
| 1.11 | Flux à travers un anneau . . . . .  | 42 |
| 1.12 | Dépendance de l'énergie en le flux . . . . .  | 43 |
| 2.1  | Schéma d'un Organic-FET et d'une hétérostructure et échelle des comportement observé dans un 2DEG . . . . .   | 48 |
| 2.2  | conductivité et résistivité à $T = 0$ . . . . .   | 49 |
| 2.3  | résistivité en fonction de $T$ à différentes densités. Signature de la TMI . . . . .  | 50 |
| 2.4  | Lois d'échelle en résistivité . . . . .   | 51 |
| 2.5  | Facteur critique $r_s^c$ en fonction de $\tau$ . . . . .  | 52 |
| 2.6  | Schéma de la caractéristique courant-tension . . . . .  | 53 |
| 2.7  | Magnétorésistance positive à la TMI sous champ magnétique parallèle . . . . .   | 54 |
| 2.8  | Définition du champ critique et variation de la densité critique sous champ . . .   | 55 |
| 2.9  | Variation de l'aimantation d'un gaz 2D en fonction de la densité . . . . .  | 56 |

|      |  |     |
|------|--|-----|
| 2.10 | Quelques zones d'ombre dans le diagramme de phase d'un gaz bidimensionnel à température nulle. . . . .   | 57  |
| 3.1  | Distribution du potentiel aléatoire . . . . .  | 60  |
| 4.1  | Deux états $\Psi_{\alpha_i}$ et $\Psi_{\alpha_{i+1}}$ couplés par le terme cinétique $\langle \psi_{\alpha_i}   H_K   \psi_{\alpha_{i+1}} \rangle$ . . . . .   | 75  |
| 4.2  | Définition d'une suite d'états $S$ contribuant à l'ordre 12 . . . . .  | 76  |
| 4.3  | Ensemble des suites de 6 sauts contribuant au courant permanent à l'ordre le plus bas . . . . .  | 79  |
| 4.4  | Valeur absolue de la sensibilité de phase $ D $ en fonction de $U$ . . . . .   | 81  |
| 4.5  | Corrections dues au désordre de la sensibilité de phase $ D_W $ . . . . .  | 83  |
| 4.6  | états dégénérés à $W = 0$ . . . . .  | 84  |
| 4.7  | Courant à $W = 0$ . . . . .  | 84  |
| 4.8  | courants locaux . . . . .  | 85  |
| 4.9  | chemin contribuant au courant transverse . . . . .   | 86  |
| 4.10 | Processus d'échange qui dépendent du spin . . . . .  | 88  |
| 4.11 | Dépendance de $J$ en $U$ . . . . .   | 90  |
| 5.1  | Structure de la matrice hamiltonienne pour $N$ particules . . . . .  | 97  |
| 5.2  | Distribution des énergies de polarisation . . . . .  | 99  |
| 5.3  | Champ de polarisation moyen . . . . .  | 100 |
| 5.4  | Polarisation spontanée du gaz . . . . .  | 101 |
| 5.5  | $\xi(S_z), \langle \gamma(S_z) \rangle$ et $\langle I_l(S_z = 0) \rangle$ en fonction de $r_s$ . . . . .   | 103 |
| 5.6  | courants locaux . . . . .  | 104 |
| 6.1  | Distribution de la première excitation. . . . .  | 106 |
| 6.2  | $\langle \Delta E \rangle$ en fonction de $r_s$ et $r_s^f$ en fonction du désordre. . . . .  | 107 |
| 6.3  | Distances entre particules $d_p$ et leurs fluctuations $u_r(p)$ à $W = 0.1$ et $5$ . . . . .   | 109 |
| 6.4  | Etats propre à $U = \infty$ et un état trapèze contribuant à l'ordre 1 en perturbation   | 110 |
| 6.5  | Dans le régime intermédiaire 3 distances sont bien établies et fluctuent peu : $d_3, d_4, d_6$ alors que les 3 autres le sont moins. On a une cristallisation partielle de trois particules. . . . . | 110 |
| 6.6  | Motifs sur sites contribuant à l'état intermédiaire. . . . .   | 111 |
| 6.7  | Slater d'ondes planes contribuant à l'états intermédiaire. . . . .   | 112 |
| 6.8  | Projections $P_0(r_s, i)$ et $P_\infty(r_s)$ du fondamental sur les états d'ondes planes et sur sites. . . . .   | 113 |
| 6.9  | Projections totales $P_t(r_s, i)$ . . . . .  | 114 |
| 7.1  | Densité d'états moyenne $\rho(E)$ à différentes interaction pour Hubbard et Coulomb  | 123 |
| 8.1  | Valeur absolue des éléments de matrices d'interactions couplant un état donné $ \alpha\alpha\rangle$ . . . . .   | 127 |
| 8.2  | Moyennes sur le désordre des valeurs absolues des amplitudes $\langle  Q(\Delta E)  \rangle$ . . .   | 128 |
| 8.3  | Inverse du temps de vie $\Gamma_{\alpha\alpha}(L_1)$ d'un état 2FP $ \alpha\alpha\rangle$ . . . . .  | 129 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 8.4  | rapport de participation $\chi$ . . . . .   | 132 |
| 8.5  | Comparaison des propriétés spectrales $P(s)$ et $\Sigma_2$ pour Hubbard et Coulomb . .                          | 133 |
| 8.6  | Paramètre $\eta$ pour des états autour de $E \approx 0$ en fonction de la portée $p$ des interactions. . . . .  | 134 |
| 8.7  | Paramètre $\eta$ en fonction de $U/t$ (Hubbard) ou de $U/(2tL)$ (Coulomb) . . . . .                             | 135 |
| 8.8  | Distribution $P(Q)$ des éléments de matrice . . . . .   | 136 |
| 8.9  | Résolution graphique, dans un sous-espace d'impulsion donné, de l'équation aux valeurs propres (8.13) . . . . . | 137 |
| 8.10 | paramètre de cristallisation $\gamma$ et fraction de sites occupés $\xi/L$ en fonction de $U/(2tL)$ . . . . .   | 138 |



# Préambule

---

Ce travail est consacré à l'étude de l'effet des interactions entre électrons dans un système quantique désordonné de basse dimension. Jusqu'à récemment, l'approche phénoménologique de Landau des liquides de Fermi constituait la théorie principale pour décrire des électrons de conduction en interaction, dans les métaux et les supraconducteurs. L'avènement de systèmes de basse dimension, où les fortes corrélations semblent jouer un grand rôle dans la conduction (comme les cuprates supraconducteurs), a montré aux théoriciens la nécessité de mieux comprendre les domaines où l'énergie Coulombienne et l'énergie cinétique sont du même ordre. En dimension un, le système est décrit par un modèle de liquide de Luttinger, qui peut-être résolu complètement pour des interactions locales par des techniques de bosonisation. En dimension deux, une théorie de fermions corrélés manque.

Le désordre, amené par les défauts comme les impuretés en physique du solide, est traité dans les modèles théoriques par l'ajout d'une énergie potentielle aléatoire. Anderson a montré en 1958 qu'une telle énergie conduit presque sûrement à une localisation exponentielle des fonctions d'ondes par un effet d'interférences. La théorie d'échelle de la localisation d'Abrahams *et al* en 1979 a ensuite stipulé qu'il ne pouvait pas y avoir de métal en dimension une ou deux en l'absence d'interactions. On est en droit de se demander si ce résultat reste vrai quand les interactions sont du même ordre de grandeur que l'énergie cinétique. Ceci est d'autant plus vrai qu'en 1994 Kravchenko *et al* ont mis en évidence une phase métallique dans des gaz bidimensionnels d'électrons, où l'énergie Coulombienne est au moins dix fois plus importante que l'énergie cinétique. Ceci justifie que l'on s'intéresse à des systèmes de basses dimensions où les effets des interactions et du désordre sont combinés. Ce problème n'est pas simple. On aurait plutôt tendance à croire que l'interaction ne peut pas transformer un système isolant en métal puisque :

- Altshuler *et al* ont montré que dans un système de Fermi désordonné l'interaction renforce la localisation. Le système reste donc un isolant dans ce cas .
- Et dans un régime de très forte interaction Coulombienne, Wigner a montré en 1934 que le système d'électrons cristallise. Le désordre a pour effet de piéger le cristal et d'empêcher un mouvement collectif. On a donc aussi un isolant dans cette limite .

Toutefois on présentera, dans les chapitres de cette thèse, des arguments montrant une moins

bonne localisation des fonctions d'onde des électrons, pour des valeurs intermédiaires des interactions en dimension un et deux.

Dans ce travail nous allons explorer numériquement le diagramme de phase d'un système d'électrons en interaction Coulombienne en présence de désordre. Ce manuscript s'articule en trois parties :

La première partie est une introduction générale au sujet où dans un premier chapitre on expose les limites isolantes connues du diagramme de phase bidimensionnel : le cristal de Wigner à forte interaction, le verre de Fermi à faible interaction et enfin les propriétés de magnétisme du système auxquelles on s'intéresse aussi. Dans le deuxième chapitre on exposera les différentes expériences montrant une transition métal-isolant en dimension deux et notamment le comportement en champ magnétique de cette transition. Enfin dans le troisième chapitre on présentera le modèle étudié et les méthodes numériques utilisées au cours de la thèse.

Dans la deuxième partie, on expose les résultats concernant l'état fondamental du cas bidimensionnel. On décrit dans le chapitre 4, la théorie de perturbation autour du cristal de Wigner. On calculera en particulier le courant permanent dont le signe, qui est indépendant du désordre, se déduit par une règle simple. Dans le chapitre 5, on étudie un système de quelques électrons et l'on met en évidence une correspondance entre le comportement de ce système et les résultats expérimentaux exposés dans le chapitre 2. Dans le chapitre 6, on étudie un système de quatre fermions sans spin dont on montre que l'état fondamental, à des interactions intermédiaires, possède des caractéristiques à la fois du solide et du liquide.

Dans la troisième partie, on s'intéresse au problème de deux particules en interaction sur une chaîne désordonnée. Dans ce problème, Shepelyansky a montré en 1994 qu'une interaction répulsive locale pouvait conduire à une délocalisation partielle de certains états. Pour ces mêmes états, en considérant une interaction Coulombienne à longue portée, on montre qu'il y a une délocalisation spatiale. On montre aussi que les statistiques spectrales sont identiques à celle d'un métal diffusif : avec une interaction à longue portée on a une statistique de Wigner-Dyson, alors qu'avec une interaction locale on atteint seulement une statistique intermédiaire de semi-Poisson.

Première partie

Introduction





# Chapitre 1

## Gaz de particules en interaction de basse dimension

---

### 1.1 Présentation du problème

On s'intéresse aux propriétés physiques d'un gaz de particules de basse dimensionnalité, c'est à dire dans un espace à une ou deux dimensions ( $d = 1; 2$ ), et à température nulle ( $T = 0$ ). Dans cette limite, connaître les propriétés du gaz revient à déterminer l'état fondamental du système  $|\psi_0\rangle$ . On s'intéressera à un système comprenant plusieurs particules qui seront indexées par  $i = 1, \dots, N$  et dont les positions dans l'espace seront notées  $\vec{r}_i$ . Dans ce système, on considère que trois types d'énergies coexistent :

- L'**énergie cinétique** décrite par un hamiltonien  $H_K$  qui est la somme de l'énergie cinétique de chaque particule.

- L'**énergie potentielle de désordre** qui supprime l'invariance par translation des variables d'espace. On prendra pour ce potentiel des valeurs aléatoires aux différents points de l'espace. Cette énergie donne lieu à des états localisés. Le hamiltonien de désordre est noté  $H_V$ .

Ces deux premiers termes ( $H_K + H_V$ ) forment la partie à 1-corps du problème.

- La dernière énergie est l'**énergie potentielle d'interaction** entre particules. Cette énergie complique sérieusement le problème puisque l'on ne peut plus considérer que le problème à  $N$  particules est une somme de problèmes à une particule. On note  $H_U$  le hamiltonien d'interaction. Les particules que nous étudions sont soit des électrons soit des trous. Leurs interactions sont donc de nature électrostatique, donc Coulombienne et à longue portée a priori. On considérera les interactions comme écrantées et éventuellement locales si l'on étudie plutôt des quasi-particules de Landau.

L'étude du problème nécessite donc la résolution d'une équation aux valeurs propres, associée

au hamiltonien  $H = H_K + H_V + H_U$ , du type de celle qui suit :

$$\left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_i^2 + V_{al}(\vec{r}_i) \right) + \frac{e^2}{\epsilon} \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \Psi[\{(\vec{r}_i; \sigma_i)\}] = E \Psi[\{(\vec{r}_i; \sigma_i)\}] \quad (1.1)$$

où  $e$  est la charge des particules,  $m^*$  leur masse effective et  $\epsilon$  la constante diélectrique du système.

### 1.1.1 La densité comme mesure de la force des interactions : $r_s$ :

On définit  $r_s$  comme le rapport de la distance moyenne  $b$  entre électrons au rayon de Bohr effectif  $a_B^*$  du système. La distance moyenne est évaluée à l'aide de la densité électronique du gaz  $n_e$  :  $b = \frac{1}{\sqrt{\pi n_e}}$  à 2D et  $b = \frac{1}{n_e}$  à 1D. Le rayon de Bohr effectif est calculé en tenant compte de la masse effective  $m^*$  des porteurs dans le milieu et de la constante diélectrique  $\epsilon$  du milieu dans lequel est créé le gaz.

$$r_s = \frac{b}{a_B^*} = \begin{cases} \frac{m^* e^2}{\hbar^2 \epsilon} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi n_e}} & 2D \\ \frac{m^* e^2}{\hbar^2 \epsilon} \cdot \frac{1}{n_e} & 1D \end{cases} \quad (1.2)$$

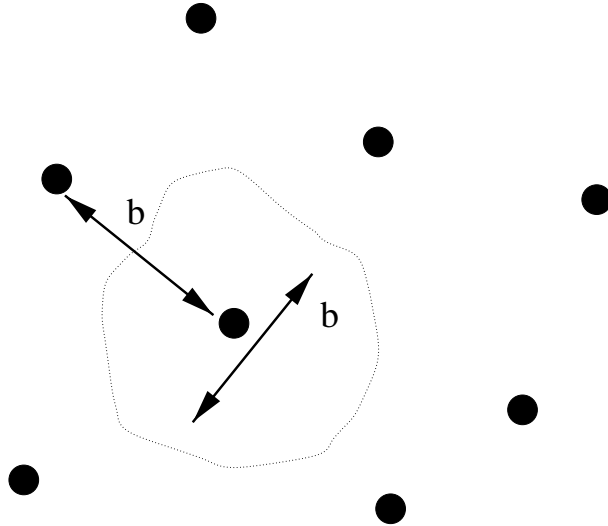


FIG. 1.1: distance moyenne  $b$  entre particules et volume moyen de confinement.

Le facteur  $r_s$  est donc une mesure de la densité électronique du système, mais le calcul suivant nous montre que c'est aussi une mesure de la force des interactions :

Si  $d$  est la dimension du système, on a une particule confinée dans un volume  $(b)^d$ . Si on la considère libre, son impulsion est quantifiée  $k_i = n_i \frac{2\pi}{b}$ ,  $i = x, y, z$  et  $n_i \in \mathbb{Z}$ <sup>1</sup>. On peut alors estimer que son énergie cinétique est  $E_K \sim \frac{d\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{2\pi}{b} \right)^2$ . La distance moyenne entre particules étant  $b$ , l'énergie potentielle électrostatique est  $E_U \sim \frac{2Ze^2}{\epsilon b}$  où  $Z$  est le nombre moyen de

<sup>1</sup>On considère ici le cas où la longueur de localisation à une particule  $L_1$ , que l'on présentera dans le paragraphe (1.3.2), vérifie  $L_1 > b$ .

premiers voisins. On obtient alors la relation entre  $r_s$  et le rapport de l'énergie d'interaction sur l'énergie cinétique :

$$\frac{E_U}{E_K} \propto \frac{Z}{2d\pi^2} \left( b \cdot \frac{m^* e^2}{\hbar^2 \epsilon} \right) = \frac{Z}{2d\pi^2} \left( \frac{b}{a_B^*} \right) \quad (1.3)$$

$$\propto r_s \quad (1.4)$$

Dans la limite de basse densité ( $b \rightarrow \infty$ ) l'énergie électrostatique diminue ( $E_U \propto b^{-1}$ ), mais l'énergie cinétique diminue encore plus rapidement ( $E_K \propto b^{-2}$ ) de telle sorte que l'énergie électrostatique domine. Wigner a le premier étudié cette limite diluée où les particules forment un réseau régulier dit "cristal de Wigner". Cette limite sera vue en détail dans le chapitre (1.2).

### 1.1.2 Diagramme de phase attendu à 2d

L'importance des interactions dans le système est entièrement caractérisée par le paramètre sans dimension  $r_s$ . On réécrit ainsi le hamiltonien sous la forme<sup>2</sup> :

$$H = \frac{1}{r_s^2} \sum_{i=1}^N \left( -\vec{\nabla}_i^2 + \tilde{V}_{al}(\vec{r}_i) \right) + \frac{2}{r_s} \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.5)$$

A faible densité ( $r_s \gg 1$ ) le terme d'interaction domine, alors qu'à forte densité ( $r_s \ll 1$ ) c'est la partie à 1-corps ( $H_K + H_V$ ) qui domine<sup>3</sup>. Ces limites définissent alors deux régimes où l'on pourra traiter une partie de l'hamiltonien en perturbation et obtenir ainsi des expressions analytiques de certaines propriétés du système :

- A forte densité, on a un système de Fermi. Sans désordre il s'agit d'un liquide de Fermi décrit par des états d'ondes planes délocalisées. Avec désordre il s'agira d'un verre de Fermi, aussi appelé isolant d'Anderson, constitué d'états localisés.
- A faible densité, on a une phase solide de Wigner. En l'absence de désordre il existe un ordre à longue distance et le solide est un cristal de Wigner qui peut avoir un mouvement collectif. L'ajout de désordre déforme le cristal et l'accroche dans les minima du potentiel. On a alors un verre de Coulomb isolant.

On peut, dans les deux limites précédentes, obtenir un développement perturbatif de certaines propriétés du système. Par exemple Gell-Mann et Brueckener ont obtenu, en l'absence de désordre, un développement de l'énergie  $E_0$  en puissance de  $r_s$  aux hautes densités [56]. Quelques années après, Carr a obtenu le développement aux basses densités [30] :

$$\begin{aligned} E_0^F &= \frac{h_0}{r_s^2} + \frac{h_1}{r_s} + O[\ln(r_s)] \text{ pour } r_s \ll 1 \\ E_0^W &= \frac{f_0}{r_s} + \frac{f_1}{r_s^{\frac{3}{2}}} + \frac{f_2}{r_s^2} + O[r_s^{-\frac{5}{2}}] \text{ pour } r_s \gg 1 \end{aligned}$$

<sup>2</sup>Les énergies sont alors exprimées en Rydbergs/électron et les longueurs en unité de  $b$  [143]

<sup>3</sup>On prendra toujours l'amplitude du potentiel de désordre plus ou moins du même ordre de grandeur que l'énergie cinétique.

La région  $r_s \sim 1$  qui ne peut être atteinte en perturbation reste un sujet actif de recherche et est l'objet de cette thèse. On s'intéressera en particulier aux changements dans le système lorsque la valeur du paramètre  $r_s$  évolue. On expose donc dans les sections qui suivent (1.2)(1.3)(1.4) quelques résultats connus dans des deux limites de hautes et basses densités.

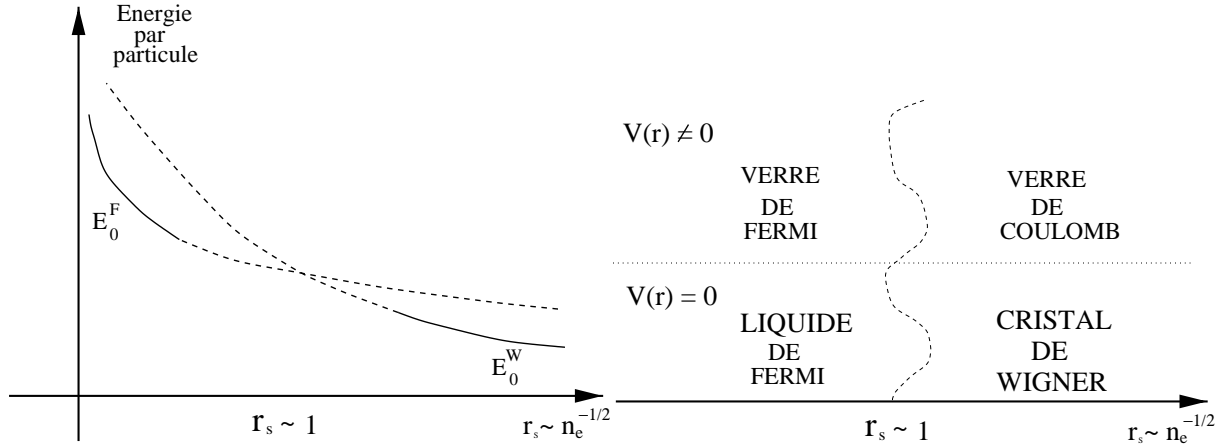


FIG. 1.2: Figure de gauche : Energie par particule  $E_0^F$  et  $E_0^W$  en trait plein et leurs extrapolations en pointillé montrant une transition entre les phases hautes et basses densités. Figure de droite : Diagramme de phase attendu pour un gaz bidimensionnel avec ( $V \neq 0$ ) et sans désordre ( $V = 0$ ) .

Dans la figure (1.2), on décrit la forme du diagramme de phase généralement acceptée, par la communauté scientifique, jusqu'aux expériences récentes et controversées [75] montrant l'existence d'une phase métallique entre les deux limites isolantes, que sont le verre de Fermi et le verre de Coulomb. On présentera ces expériences dans le deuxième chapitre et on terminera cette partie introductive par la présentation du modèle sur réseau étudié analytiquement et numériquement dans les parties (II) et (III) de cette thèse.

## 1.2 La limite de basses densités : $r_s \gg 1$

Wigner est le premier à avoir suggéré en 1934 que des électrons cristallisent à suffisamment basse densité, lorsque la distance entre eux (mesurée par le facteur  $r_s$ ) est telle que l'énergie d'interaction Coulombienne domine par rapport à l'énergie cinétique [156]. Ce cristal, appelé cristal de Wigner, n'a jamais été vu en dimension trois. En dimension deux, suivant une idée de Crandall et Williams [40] en 1971, on peut voir le cristal d'électrons à la surface de l'Hélium. Dans toute cette section on appellera  $\vec{b}$ , un vecteur de Bravais du réseau de particules.

### 1.2.1 Le Cristal de Wigner

#### Phase électrostatiquement stable

L'étude de l'énergie électrostatique du solide d'électrons en fonction de son réseau de Bravais a été étudié en dimension trois par Fuchs [55], qui a démontré que le réseau cubique-face-centré est le plus stable. En dimension deux, l'étude a été faite par Bonsall et Maradudin [22] qui démontrent que parmi tous les réseaux à deux dimensions, le réseau hexagonal possède la plus petite énergie électrostatique en l'absence de désordre. A deux dimensions, le réseau hexagonal est équivalent à un réseau triangulaire, où l'énergie d'interaction par maille  $E_{HEX}$  est minimale pour toutes les densités électroniques  $n_e$ . On peut par exemple comparer cette énergie à celle du réseau carré :

$$E_{HEX} = -3.921034e^2\sqrt{n_e} < E_{Carré} = -3.900265e^2\sqrt{n_e} \quad (1.6)$$

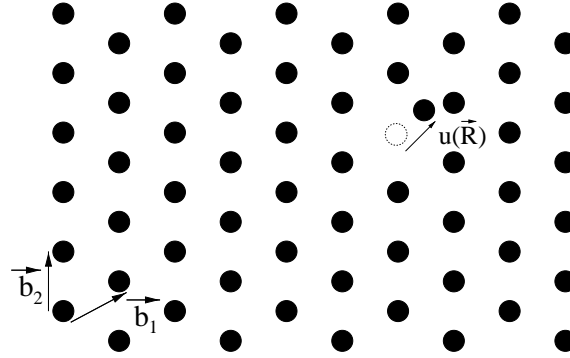


FIG. 1.3: Réseau hexagonal du cristal de Wigner à 2d. On désigne par  $\vec{b}_1$  et  $\vec{b}_2$  les vecteurs de base du réseau, et  $\vec{u}(\vec{R})$  le déplacement de la particule au site  $\vec{R}$  par rapport à sa valeur d'équilibre.

#### Caractérisation de l'ordre dans un système bidimensionnel

Le Théorème de Mermin-Wagner [94] stipule qu'il ne peut exister, en dimension deux, de cristal à température finie, puisque les phonons de grandes longueurs d'ondes détruisent

l'ordre à longue distance. On a ainsi un déplacement quadratique moyen  $\overline{u^2}$  qui diverge logarithmiquement avec la taille du système. Toutefois la divergence étant lente, les domaines où les particules sont ordonnées sont de tailles suffisantes pour être observés. Pour caractériser un arrangement spatialement ordonné de particules, on utilise la fonction de structure  $S_{\vec{G}}(\vec{q})$  qui est mesurable dans une expérience de diffraction et qui est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation densité-densité<sup>4</sup>  $C_{\vec{G}}$ . Le fait que le cristal est observable et que l'on a un quasi-ordre à longue distance se traduit par une décroissance algébrique de la fonction de corrélation  $C_{\vec{G}}$ . Cette décroissance (d'exposant  $\eta$ ) est moins brutale que la décroissance exponentielle observée dans le cas d'un liquide. Si on appelle  $\vec{u}(\vec{R})$  le déplacement de la particule du site  $\vec{R}$  par rapport à sa position d'équilibre, on a alors :

$$C_{\vec{G}}(r) = \langle e^{i\vec{G} \cdot (\vec{u}(\vec{R}+\vec{r}) - \vec{u}(\vec{R}))} \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} r^{-\eta} \quad (1.7)$$

Un cristal est défini comme un arrangement ordonné de particules, positionnées à des distances bien précises les unes par rapport aux autres et dans des directions bien précises. Ainsi à 2d on sait que le cristal est triangulaire. Pour caractériser l'ordre orientationnel, on introduit par analogie une fonction de corrélation angulaire  $C_*$ . On définit  $\theta(\vec{R})$  l'angle fait par le vecteur  $\vec{O}(\vec{R}) = (\vec{u}(\vec{R} + \vec{b}) + \vec{b} - \vec{u}(\vec{R}))$  avec un axe arbitraire, et  $\vec{b}$  un vecteur de base du réseau. La trace de l'ordre orientationnel dans le solide se mesure par le fait que la fonction  $C_*$  tend vers une constante à grande distance. On a en effet :

$$C_*(r) = \langle e^{i6(\theta(\vec{R}+\vec{r}) - \theta(\vec{R}))} \rangle \text{ et } \langle \vec{O}(\vec{R}) \cdot \vec{O}(\vec{0}) \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} b^2 \quad (1.8)$$

### Mise en évidence expérimentale à la surface de l'Hélium

Quand, à l'aide d'un champ électrique, on essaie de plaquer des électrons à la surface de l'Hélium, l'apparition de charges images dans l'Hélium repousse les électrons loin de la surface [44]. La combinaison de ces deux effets crée un potentiel de confinement pour les électrons qui forment un gaz à la surface de l'Hélium. À très basse température, lorsque l'énergie d'interaction domine l'agitation thermique, on a cristallisation. Traditionnellement on teste la présence d'un ordre spatial par des expériences de diffractions, mais un calcul de section efficace de diffusion montre qu'aux densités électroniques considérées, on ne peut s'attendre à avoir une réponse mesurable. Dans ce système, la nature hexagonale du réseau a été démontrée par l'étude des fréquences de résonance du système couplé {électrons + Hélium} [58] : on détecte la manière dont les modes phononiques du réseau électronique se couplent avec les modes de vibration de la surface de l'Hélium. Dans ces systèmes, les densités électroniques obtenues à la surface de l'hélium sont telles que le paramètre  $r_s$  est de l'ordre de  $10^3$ . On est alors dans une limite classique et loin du régime quantique. On ne peut l'atteindre, car si l'on augmente par trop la densité, le système {électrons + Hélium} devient instable.

---

<sup>4</sup> $\vec{G}$  est un vecteur du réseau réciproque.

### 1.2.2 La fusion du cristal de Wigner

#### 1.2.2.A Estimation du paramètre de cristallisation $r_s^w$

##### Critère de fusion de Lindemann :

Le critère empirique de Lindemann [85] donne un critère de fusion pour les solides<sup>5</sup> : un solide fond lorsque le déplacement carré moyen  $\overline{u^2}$  des particules du solide, autour de leur position d'équilibre, atteint une certaine valeur critique. Cette valeur critique est une certaine fraction de la distance moyenne  $b$  entre particules. Si on appelle  $N$  le nombre total de particules dans le solide, on a en dimension 3 :

$$\overline{u^2} = \frac{\sum_{\vec{R}} \vec{u}^2(\vec{R})}{N} \text{ avec le paramètre critique } \overline{u^2}_c \sim 0.01b^2 \quad (1.9)$$

Pour un système 2d, le déplacement carré moyen diverge logarithmiquement :  $\overline{u^2} \propto \ln N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \infty$ . Il faut donc utiliser un critère de Lindemann modifié. Bedanov *et al* [11] considèrent alors plutôt les fluctuations de distances entre plus proches voisins  $\overline{u^2}_1 = \frac{\sum_i |\vec{u}(\vec{R}+\vec{b}) - \vec{u}(\vec{R})|^2}{N}$ , qui est une quantité qui ne diverge pas pour un solide bidimensionnel. En utilisant des simulations Monte-Carlo, on peut déterminer le paramètre critique  $\overline{u^2}_{1c} \sim 0.09b^2$ . On peut étendre ce paramètre et étudier les fluctuations des autres distances :  $2^{mes}$ ,  $3^{mes}$ , ...,  $r^{mes}$  voisins en leur associant un paramètre  $\overline{u^2}_r$ . On utilisera un paramètre analogue  $u_r$ , dans le chapitre 6, pour l'étude de la cristallisation quantique dans des petits systèmes.

##### Simulations Monte-Carlo :

Les méthodes Monte-Carlo sont des outils puissants pour accéder à des bornes supérieures sur l'énergie fondamentale d'un système. Je présenterai les principes de la méthode et les résultats sur le cristal de Wigner, en m'inspirant du cours des Houches de D. Ceperley et de l'article de Tanatar et Ceperley [34, 35, 143]. Les méthodes Monte-Carlo (MC) sont utilisées pour obtenir l'énergie du fondamental d'un système de  $N$  particules. La limite thermodynamique ( $N = \infty$ ) est ensuite déterminée par une extrapolation de taille finie en faisant varier  $N$ . Les tailles accessibles numériquement sont de l'ordre de la centaine de particules  $N \sim 10^2$ . Il existe plusieurs types de techniques (MC), on présente ici la technique variationnelle notée (VMC). Pour estimer l'énergie d'un système de  $N$  particules, les méthodes (VMC) utilisent des fonctions d'essai adaptées à la description des limites de fortes densités (liquide de Fermi) et de faibles densités (Cristal de Wigner). Les paramètres d'une fonction d'onde à  $N$  particules sont les positions des  $N$  particules. On appellera génériquement  $R$  une configuration représentant les positions des  $N$  particules :  $R = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\}$ .

Les fonctions d'onde d'essai sont du type "Slater-Jastrow" :

$$\Psi_T(R) = D(R) \exp\left(-\sum_{i < j}^N u(|r_i - r_j|)\right), \quad (1.10)$$

---

<sup>5</sup>Il est souvent utilisé en simulations numériques

- Le terme  $D(R)$  est un déterminant de Slater décrivant bien une limite (forte ou faible interaction). On note  $N \uparrow$  le nombre de spin "up" et  $N \downarrow$  le nombre de spin "down". On définit alors la polarisation d'un système de particules de spin (1/2) par  $\xi = \frac{N\uparrow - N\downarrow}{2}$ . A une polarisation  $\xi$  fixée,  $D(R)$  est de la forme générale :

$$D(R) = \begin{vmatrix} \Phi_1(\vec{r}_1) & \Phi_1(\vec{r}_2) & \cdots & \Phi_1(\vec{r}_{N\uparrow}) \\ \Phi_2(\vec{r}_1) & \Phi_2(\vec{r}_2) & \cdots & \Phi_2(\vec{r}_{N\uparrow}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{N\uparrow}(\vec{r}_1) & \Phi_{N\uparrow}(\vec{r}_2) & \cdots & \Phi_{N\uparrow}(\vec{r}_{N\uparrow}) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Phi_1(\vec{r}_1) & \Phi_1(\vec{r}_2) & \cdots & \Phi_1(\vec{r}_{N\downarrow}) \\ \Phi_2(\vec{r}_1) & \Phi_2(\vec{r}_2) & \cdots & \Phi_2(\vec{r}_{N\downarrow}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{N\downarrow}(\vec{r}_1) & \Phi_{N\downarrow}(\vec{r}_2) & \cdots & \Phi_{N\downarrow}(\vec{r}_{N\downarrow}) \end{vmatrix} \quad (1.11)$$

Dans la limite de forte densité (liquide de Fermi), on prendra pour  $\Phi_i$  des fonctions d'onde du problème à une-particule. Ainsi pour un système sans désordre on prendra les états délocalisés :  $\Phi_i(\vec{r}_j) \sim \exp[i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_j]$ . Dans la limite de faible densité (cristal de Wigner), on prendra pour  $\Phi_i$  des fonctions d'onde localisées sur les sites  $Z_j$  du cristal, par exemple  $\Phi_i(\vec{r}_j) \sim \exp[-C(\vec{r}_j - \vec{Z}_j)^2]$ .

- le terme  $u(R)$  est un pseudo-potentiel, traduisant les corrélations entre les différentes orbitales intervenant dans les déterminants de Slater, qui pourra être choisi de plusieurs formes (RPA, Yukawa, ..., [34])

Il existe d'autres méthodes (MC). Le facteur commun à toutes ces méthodes est que, pour l'étude des transitions de phases liquide-solide, on obtient une énergie associée à la limite solide que l'on compare à une autre énergie associée à la limite liquide. La transition se situe quand ces deux énergies sont égales. Les autres méthodes (MC) donnent des résultats plus précis (ils diminuent la borne supérieure sur l'énergie), mais reposent toujours sur des hypothèses non vérifiées. Par exemple la méthode de "Diffusion" utilisée dans le travail de Tanatar et Ceperley [143] suppose que les zéros de la fonction d'onde sont connus et qu'ils ne changent pas lorsque le facteur  $r_s$  augmente. Ils considèrent alors deux types de structures nodales : la première correspondant au liquide et la deuxième au solide.

La comparaison de l'énergie associée à chaque limite donne la phase stable. Par exemple dans la figure (1.4), tirée de la référence [143], on suit l'énergie en fonction du paramètre  $r_s$  pour trois limites. La première correspond au fluide non-polarisé, la deuxième à un fluide totalement polarisé et la troisième à la phase solide. La phase solide devient stable pour  $r_s > 37$ . C'est le résultat qui fait référence dans le domaine :

$$r_s^w = 37 \pm 5 \quad (1.12)$$

Concernant l'effet du désordre, on sait que la limite n'est plus un cristal mais un verre de Wigner avec une longueur de corrélation finie suivant la force du désordre, qui peut-être estimée par un argument d'Imry et Ma [69]. L'étude (MC) du système avec désordre montre que le seuil de cristallisation passe de  $r_s^w = 37$  à des valeurs plus petites [37] de l'ordre de  $r_s^w \sim 7.5$ . L'étude de l'aimantation du gaz 2d, par des méthodes Monte-Carlo, donne des résultats contradictoires : Rapisarda et Senatore prédisent une phase intermédiaire aimantée [113], ce que l'on ne voit pas sur la figure(1.4) [143]. En effet, la différence d'énergie due à un changement de spin est souvent très petite, elle correspond à un changement de recouvrement des orbitales



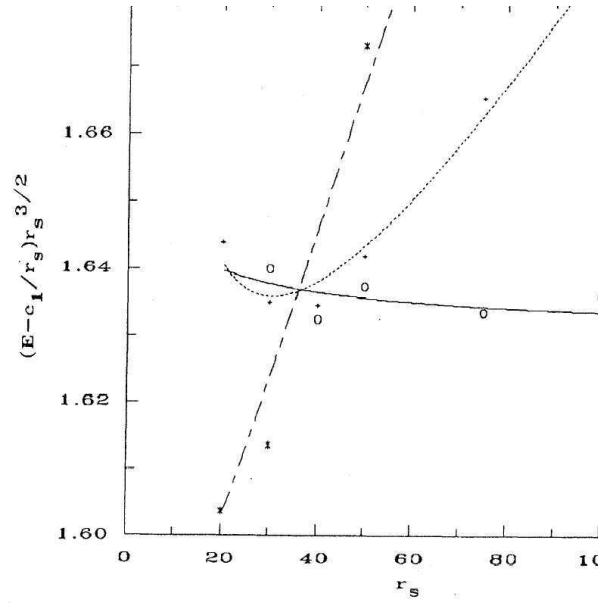


FIG. 1.4: Figure tirée de la référence [143]. L'énergie du fondamental  $E(r_s, \xi)$  pour différentes polarisations  $\xi$  : fluide non-polarisé(tirets), fluide totalement polarisé(pointillés) et phase solide(trait plein).  $c_1$  est la constante de Madelung.

de spins différents. Ainsi plus les états sont localisés plus les différences sont petites. Le magnétisme du gaz 2D reste un sujet d'actualité dont on donnera quelques résultats connus dans la section (1.4).

### 1.2.2.B Mécanisme de fusion du cristal

Dans les systèmes à la surface de l'hélium, le rapport de l'énergie d'interaction sur l'énergie cinétique est très grand  $r_s \sim 10^3 - 10^4$ . Le cristal obtenu est donc classique et ce sont les fluctuations thermiques qui engendrent la transition solide-liquide. Il est cependant possible qu'il puisse exister des analogies avec le cas où les fluctuations quantiques dominent, qui est notre sujet d'intérêt. On présente donc, dans ce qui suit, la fusion classique et quelques spéculations concernant la fusion quantique.

#### La fusion classique :

Kosterlitz et Thouless [72] ont proposé un modèle pour la fusion à deux dimensions, dans lequel l'ordre solide à longue portée est détruit par la dissociation de paires de dislocations. Une dislocation est un défaut topologique du réseau qui est caractérisé par son vecteur de Burger  $\vec{B}$  (voir dans la figure(1.5)). Le vecteur de Burger se définit en traçant un chemin, entourant le coeur de la dislocation, faisant  $n$  sauts dans chaque direction du cristal de manière à revenir sur ses pas. Sans dislocation, un tel chemin est fermé. Avec dislocation il ne l'est pas et le vecteur nécessaire à la fermeture du chemin est le vecteur de Burger. L'énergie  $E_d$  d'une telle dislocation diverge logarithmiquement avec la taille  $L$  du système ( $E_d = A \ln(L/b)$ ). Lorsque

l'on associe les dislocations par paires de vecteurs de Burger opposés (voir figure (1.5)), leur énergie reste finie ( $E_{pair} = 2A \ln(r/b)$ ) car une paire n'affecte pas l'ordre à longue distance du réseau.

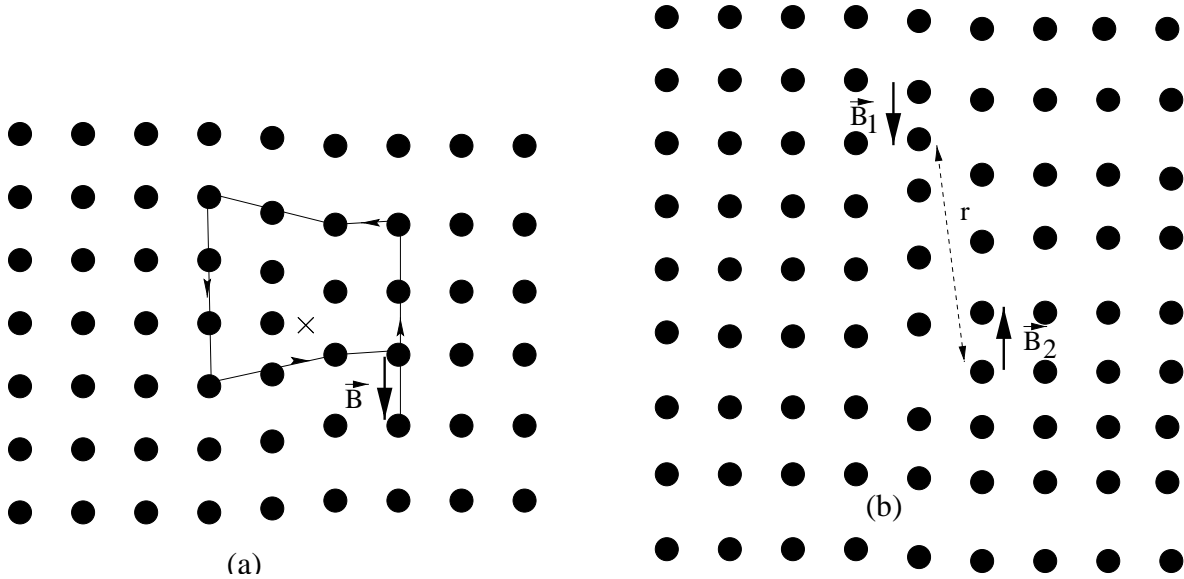


FIG. 1.5: (a) Dislocation isolée dans un réseau carré, on marque par une croix le coeur de la dislocation de vecteur de Burger  $\vec{B}$ , ce dernier est défini par le chemin où l'on a pris  $n = 3$ . (b) Dislocations liées en paire de vecteurs de Burger opposées et distantes de  $r$ .

L'idée de Kosterlitz et Thouless est qu'à basse température, les dislocations forment des paires, qui dans le solide ne détruisent pas l'ordre à longue distance, alors qu'à température élevée les paires se dissocient. On estime la température de fusion par un argument de type énergie-entropie : on peut positionner le coeur de la dislocation sur chacun des  $(L/b)^2$  sites du réseau ; on peut donc considérer que l'entropie d'une dislocation vaut  $S_d = k_B \ln(L/b)^2$  et que l'énergie libre de la dislocation est :

$$F = E_d - TS_d = (A - 2k_B T) \ln(L/b). \quad (1.13)$$

$F$  diverge à la limite thermodynamique ( $L \rightarrow \infty \Rightarrow F \rightarrow \pm\infty$ ), et donc à basse température une dislocation isolée n'est pas stable, alors qu'à haute température elle l'est. Une estimation de la température critique de fusion est alors  $T_{c1} = (A/2k_b)$ . Cette image simplifiée de la fusion, qui néglige les interactions entre les dislocations, est confirmée par une étude plus rigoureuse dans le cadre de la théorie du groupe de renormalisation [72].

Au dessus de  $T_{c1}$ , Halperin, Nelson [61] et Young ont réalisé que le fluide n'est pas isotrope. Il est donc nécessaire qu'il y ait une deuxième transition, pour obtenir la phase liquide isotrope, à une température supérieure  $T_{c2} > T_{c1}$ . Cette phase intermédiaire non-isotrope est appelée Hexatique. Elle conserve un ordre orientationnel ( $C_6(r)$  décroît algébriquement lorsque  $r$  tend vers l'infini), alors que l'ordre translationnel est perdu ( $C_{\vec{G}}(r)$  tend exponentiellement vers zéro lorsque  $r$  tend vers l'infini).

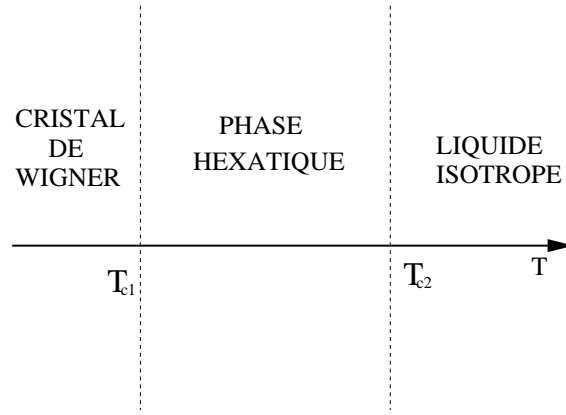


FIG. 1.6: Diagramme de phase de la fusion classique

### La fusion quantique ?

Le mécanisme de la fusion quantique du cristal ( $T = 0$ ), quand on augmente la densité  $n_e$  d'électrons, n'est pas connu. Ce paragraphe présente donc quelques spéculations concernant cette transition.

Andreev et Lifshitz ont proposé en 1969 l'existence d'une phase solide lacunaire entre les phases solide de Wigner et liquide à température nulle [8]. Dans ce solide lacunaire les défauts ne seraient pas localisés et se déplaceraient par effet tunnel. "Une telle phase ne serait ni un solide ni un liquide"<sup>6</sup> mais posséderait des caractéristiques des deux phases. Ainsi en dimension  $d$  on constaterait  $(d + 1)$  branches de dispersion pour les modes de propagation de ce solide lacunaire :  $d$  branches correspondant aux modes acoustiques de vibration du cristal et le dernier mode correspondant au liquide. Castaing et Nozières conjecturent l'existence d'une telle phase pour l' $^3\text{He}$  polarisé sous pression [31]. Toutefois aucune expérience n'a jamais démontré de façon convaincante l'existence de cette phase solide lacunaire.

La nature et la structure de cette phase solide lacunaire ne sont pas claires :

- En se plaçant dans la limite de très forte interaction, on peut imaginer qu'une particule se positionne dans un site interstitiel créant ainsi un défaut particule-trou dans le cristal. La création de ce défaut amène un coût énergétique qui peut être compensé par la délocalisation par effet tunnel de ce défaut. On peut donc imaginer la coexistence d'un cristal de Wigner partiellement fondu avec des paires particule-trou délocalisées.
- En se plaçant dans la limite d'interaction nulle, on peut considérer que l'interaction crée des paires de particules corrélées près de la surface de Fermi sans affecter les états éloignés de cette surface. Les premiers forment une structure presque solide coexistant avec une mer de Fermi d'énergie réduite formée par les seconds. Cette possibilité a été proposée par Bouchaud *et al* pour l' $^3\text{He}$  liquide [23]. Ils ont aussi proposé une fonction d'onde variationnelle pour décrire cet état. On note aussi que cette fonction d'onde de type BCS possède un ensemble de zéros bien différents de ceux étudiés dans les simulations (MC) [143].

L'existence de la phase proposée par Andreev et Lifshitz ne dépend pas de la statistique des

---

<sup>6</sup>phrase tirée et traduite de [8]

particules composant le solide. On doit donc l'obtenir pour des fermions comme pour des bosons. Scalettar *et al* ont étudié un modèle d'Hubbard de bosons à 2d par une méthode de Monte-Carlo quantique autour du demi-remplissage. Ils exhibent les signatures d'une phase supersolide où une partie des bosons se solidifient alors que les autres restent mobiles [10, 118]. Les résultats (MC) pour des bosons étant exacts [35], cela conforte l'idée d'une phase intermédiaire du type Andreev-Lifshitz. Des électrons confinés dans un potentiel harmonique ont aussi été étudiés par des méthodes (MC). Ces études montrent que la cristallisation se déroule en deux étapes. On a d'abord un ordre radial qui s'établit avec les électrons qui se rangent par couches concentriques par rapport au centre du puits. Puis on a un gel des mouvements de rotation des couches entres-elles. On a donc aussi dans ce cas une phase intermédiaire avec un comportement particulier.

### 1.3 La limite de hautes densités : $r_s < 1$

Dans cette limite la plupart des effets peuvent se comprendre qualitativement par une théorie sans interaction incorporant le principe d'exclusion de Pauli. Cette théorie semi-classique de Sommerfeld donne qualitativement les bons comportements en température pour la chaleur spécifique et la susceptibilité mais pas les bons ordres de grandeurs. Il faut pour cela utiliser la théorie des liquides de Fermi que l'on présente dans cette section avec les principaux effets dus au désordre.

#### 1.3.1 Liquide de Fermi

La théorie des liquides de Fermi développée par Landau<sup>7</sup>, considère qu'il y a une correspondance exacte entre les excitations de basse énergie des systèmes avec et sans interaction. Aussi peut-on indexer les excitations des deux systèmes par les mêmes nombres quantiques parmi lesquels : la charge, le spin ou encore l'impulsion pour un système sans désordre. On considère alors que les états avec interactions proviennent des états sans-interaction par un branchement adiabatique des interactions. Le seul effet des interactions est alors de renormaliser la vitesse. Ainsi les excitations de basses énergies appelées quasi-particules ont une masse différente de celle des électrons sans interaction. Cette théorie phénoménologique se retrouve à partir de calculs sur un modèle microscopique [99] et est en partie confirmée par des arguments du groupe de renormalisation [125]. Les excitations de basse énergie restant confinées autour de l'énergie de Fermi  $\epsilon_f$ , toutes les grandeurs physiques dépendent uniquement de la densité d'état au niveau de Fermi notée  $\frac{dN_s}{d\epsilon_f}$ , où  $N_s$  est le nombre d'états du système. Tous les systèmes de basse dimension ne se traitent pas toujours à l'aide de la théorie des liquides de Fermi. Par exemple, la théorie de Laughlin pour l'effet hall quantique fractionnaire, dans un gaz 2D en champ magnétique fort, n'en est pas une. On notera aussi que la théorie du liquide de Fermi ne s'applique pas en dimension une, puisqu'on ne peut définir de quasi-particule [90]. Dans ce cas, on a alors affaire à un liquide de Luttinger que l'on peut traiter analytiquement par des techniques de bosonisation. Le liquide de Fermi n'est valable que si l'on peut obtenir

---

<sup>7</sup>On peut consulter Le livre de Pines et Nozières [106] pour une revue.

continûment les états en interaction à partir des états sans interaction. Par exemple s'il survient un croisement de niveau entre l'état fondamental initial et un état excité, la théorie n'est plus valable. Typiquement c'est le cas quand on a une instabilité où l'on crée un état de plus basse énergie que celle de l'état fondamental initial : l'instabilité de Cooper de la transition supraconductrice ou l'instabilité de Peierls pour les ondes de densité de charge [125] en sont des exemples. De même en dimension deux et à très basse densité l'énergie de corrélation est très forte [156]. On a une transition vers un cristal de Wigner à  $r_s^w$ . La théorie du liquide ne doit donc plus s'appliquer au delà d'une certaine valeur de l'interaction  $r_s^f$ , avec a priori  $r_s^f \leq r_s^w$ .

### 1.3.2 Les longueurs du problème

Pour mieux définir le régime dans lequel on se place, on compare la taille du système  $L$  à différentes tailles associées à des effets provenant des différentes parties du hamiltonien. On énumère ici ces différentes tailles, souvent utilisées par les expérimentateurs pour caractériser leurs échantillons.

#### Longueur d'onde de Fermi $\lambda_f$

Pour un métal type liquide de Fermi, les porteurs sont des quasi-particules qui sont des excitations de basse énergie autour de l'énergie de Fermi  $\epsilon_f$ . Les quasi-particules ont donc toutes une longueur d'onde de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi  $\lambda_f = \frac{2\pi}{k_f}$ .

#### Longueur de cohérence de phase $L_\Phi$

Dans un système à forte densité, on a un liquide de Fermi de quasi-particules indépendantes. Tous les couplages sont alors considérés comme des perturbations, notamment les couplages inélastiques qui entraînent de la décohérence et auxquels on associe un temps caractéristique  $\tau_\Phi$ . Il existe principalement deux sources de décohérence pour des quasi-particules. La première est le couplage avec les phonons du réseau d'atomes. La deuxième est le couplage dû aux interactions entre quasi-particules. Dans les expériences, la cohérence est mesurée par la suppression des corrections quantiques à la conductance, lorsque l'on applique un champ magnétique. Ces corrections sont rappelées dans la section (1.3.3). On associe au temps  $\tau_\Phi$  des domaines de taille caractéristique  $L_\Phi$ , dans lesquels on peut observer des interférences. Dans un système diffusif<sup>8</sup>, on aura  $L_\Phi = \sqrt{D\tau_\Phi}$ , où  $D$  est la constante de diffusion du milieu, qui est reliée à la conductivité  $\sigma$  du système par la relation d'Einstein  $\sigma = e^2 \frac{\partial N_s}{\partial \mu} D$ . Il est intéressant de connaître, dans les expériences sur les gaz bidimensionnels, le nombre de porteurs se trouvant dans un domaine de cohérence de phase de taille  $L_\Phi$ . Des mesures de temps de cohérence de phase, pour des trous dans des hétérostructures [109] GaAs/AlGaAs et des électrons dans

---

<sup>8</sup>Dans le cas d'un conducteur ballistique ( $L \ll l$ ), on a plutôt  $L_\Phi = \frac{\hbar k_F}{m^*} \tau_\Phi$

des MOSFET au silicium [84], nous donnent<sup>9</sup>  $L_\Phi$  de l'ordre de  $4.10^{-8}m$ , avec des densités entre  $10^{14}$  et  $10^{15}$  particules par  $m^2$ . On trouve donc que, à deux dimensions dans un domaine de taille  $L_\Phi^2$ , on a entre une dizaine et une centaine de particules. Cette constatation justifie en partie l'intérêt d'étudier des systèmes avec un petit nombre de particules dans les parties (II) et (III) de cette thèse.

### Libre parcours moyen $l$ et longueur de localisation à une particule $L_1$

On définit le libre parcours moyen  $l$  comme la distance typique entre deux collisions d'une particule avec des impuretés. En comparant  $l$  à  $\lambda_f$  on peut définir deux régimes de désordre. C'est le critère de Yoffe-Regel :

- Si  $l \gg \lambda_f$  les impuretés sont diluées. Une vision semi-classique, où les porteurs sont vus comme des particules ponctuelles qui diffusent sur les impuretés, décrit alors bien les phénomènes physiques. Cette relation se réécrit  $k_f.l \gg 1$ , on est dans une limite où le désordre est considéré comme faible. Si de plus  $L < l$ , alors le système est dit balistique : l'impulsion reste un bon nombre quantique. Si  $L > l$ , alors le système est diffusif : l'impulsion n'est plus un bon nombre quantique. Toutefois si les impuretés sont diluées, on peut traiter leurs effets en perturbation dans la base des impulsions. Ainsi si  $L_\Phi > l$ , on peut calculer les premières corrections à la conductance dans ce régime de localisation faible. On rappellera les résultats du calcul dans le paragraphe (1.3.3).
- Si  $l \sim \lambda_f$  ce qui est équivalent à  $k_f.l \sim 1$ , la nature ondulatoire domine et des interférences destructives entraînent la localisation des états du système [5]. On est dans un régime de localisation forte qui sera étudié dans le paragraphe (1.3.3). On introduit alors la taille typique de l'extension d'une fonction d'onde qu'on appelle longueur de localisation à une particule  $L_1$ . On a toujours  $L_1 > l$  (la localisation est une conséquence de la présence importante d'impuretés) et le système est toujours diffusif pour des tailles inférieures à  $L_1$ . Pour des tailles supérieures on a absence de diffusion.

### Longueur d'écrantage $\lambda_{nD}$

A forte densité, un potentiel extérieur  $\Phi$  est écranté par les charges mobiles. En effet  $\Phi$  induit une variation  $\delta\rho$  dans la densité de charge, qui elle-même induit une variation du potentiel  $\delta\Phi$ , donnant un potentiel total effectif  $\Phi_t = \Phi + \delta\Phi$ . Le potentiel et la variation de charge induite sont reliés à l'équilibre par l'équation de Poisson

$$\Delta(\delta\Phi) = -\delta\rho/\epsilon$$

où  $\epsilon$  est la constante diélectrique du milieu. Dans l'approximation de Thomas-Fermi, la variation de charge dépend du potentiel local  $\Phi_t(r)$  vu par ces charges. En linéarisant autour de l'énergie de Fermi, on obtient au premier ordre dans les variations :

$$\delta\rho = -\frac{e}{V}[N_s(\epsilon_f + e\Phi_t(r)) - N_s(\epsilon_f)] \approx -\frac{e^2}{V}\Phi(r)\frac{dN_s}{d\epsilon_f}$$

---

<sup>9</sup>A 2D, on a  $\frac{\partial N_s}{\partial \mu} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}$  et, des expériences, on tire que  $\sigma \sim \frac{e^2}{h}$  et que  $\tau_\Phi \sim 10^{-11}s$ . On calcule alors  $D \sim 1.45.10^4 m^2 s^{-1}$  puis  $L_\Phi$ .

où  $V$  est le volume du système. Si on considère que le potentiel est crée par une charge rajoutée au système ( $\Phi = e/(\epsilon r)$ ), la résolution des équations précédentes nous donne que le potentiel de cette charge est écranté. L'écrantage est de moins en moins bon quand on diminue la dimension du système, ainsi on a [7] :

$$\Phi_t(r) \propto \begin{cases} \frac{1}{r} \exp(-r/\lambda_{3D}) & 3D \\ (\frac{\lambda_{2D}}{r})^3 & 2D \text{ et } r > 1 \end{cases} \quad (1.14)$$

L'existence de ces longueurs  $\lambda_{nD}$  d'écrantage justifie que l'on considère souvent, à haute densité, une interaction locale entre quasi-particules de Landau. Toutefois à faible densité (cristal de Wigner), il doit nécessairement y avoir une brisure dans le mécanisme d'écrantage : dans le cristal les charges sont localisées, elles ne sont donc plus mobiles et ne peuvent donc plus s'écranter.

Pour étudier le passage de la limite de forte densité à celle de faible densité, il est alors préférable (comme on le fait dans cette thèse) d'étudier le hamiltonien microscopique des électrons avec leurs interactions nues (Coulombiennes à longue portée), plutôt qu'un hamiltonien effectif de quasi-particules avec des interactions locales.

### 1.3.3 Effet du désordre

On considère dans cette section le problème sans interaction. En l'absence de désordre les états sont délocalisés sur tout le système et conduisent donc le courant. On présente dans cette section les modifications qu'apportent un potentiel de désordre. On verra notamment que sans interaction tous les états sont exponentiellement localisés et qu'il ne peut pas y avoir de métal à 2d.

#### 1.3.3.A Désordre fort - Localisation d'Anderson

En présence de désordre, la diffusion sur les impuretés conduit, par interférences destructives, à la localisation des fonctions d'onde. Anderson a étudié ce phénomène [5] à l'aide d'un modèle sur réseau. Le hamiltonien utilisé comporte un terme de saut entre sites plus proche voisins  $\langle i, j \rangle$  et un potentiel sur site  $v_i$ . Ce dernier est une variable aléatoire de distribution uniforme de largeur  $2W$ .

$$H_{Anderson} = \sum_{\langle i, j \rangle} t c_i^\dagger c_j + t^* c_j^\dagger c_i + \sum_i v_i c_i^\dagger c_i \quad (1.15)$$

Le paramètre  $u = \frac{W}{2t}$  est une mesure du désordre. En considérant le terme de couplage inter-site comme une perturbation et en étudiant la convergence de la self-energie, Anderson en déduit que tous les états sont localisés<sup>10</sup>, si  $u$  est supérieur à une certaine valeur critique  $u_c$ . Quand  $u < u_c$ , seuls certains états en bord de spectre sont localisés. Les frontières en

---

<sup>10</sup>On considère un site 'i'. Si la contribution de sites lointains (de  $i$ ) à la self-energie de la fonction de Green  $\langle i | G(E) | i \rangle$  est négligeable, alors les états d'énergie  $E$  sont localisés. Une limite supérieure pour  $u_c$  est donnée par l'équation suivante  $eZ \ln(u_c) = u_c$  où  $Z$  est la connectivité du réseau et  $e = 2.718...$

énergie séparant les états localisés et délocalisés sont appelés bords de mobilité. Ces bords de mobilité se rapprochent du centre du spectre au fur et à mesure que  $u$  croît et se rejoignent à  $u = u_c$ . Quand la dimension de l'espace est inférieure à deux, toutes les fonctions d'onde sont localisées autour d'un site  $i_0$  quelque soit le désordre considéré. On constate alors que l'enveloppe des fonctions d'onde décroît très fortement, typiquement de façon exponentielle  $\left(|\Psi(i)| \sim e^{-\frac{|i-i_0|}{L_1}}\right)$  autour du centre<sup>11</sup>  $i_0$ .

On a alors une nouvelle forme d'isolant : le système possède une conductivité nulle alors que la densité d'états au niveau de Fermi est non-nulle et qu'il n'y a pas de gap en énergie. Les particules ne diffusent plus au delà de la taille  $L > L_1$  et les états ne conduisent plus le courant :

$$\sigma = 0$$

Le modèle d'Anderson unidimensionnel a été étudié analytiquement, notamment à l'aide de matrices de transferts [89]. On peut calculer dans ce cas la longueur de localisation  $L_1$  par un développement à faible désordre ( $W \ll t$ ) :

$$L_1(\epsilon_\alpha) = \frac{8\sin^2(k_\alpha)}{\langle v^2 \rangle} \quad (1.16)$$

On notera que pour un problème en milieu de bande ( $k_\alpha \sim \frac{\pi}{2}$ ) et pour la distribution de potentiel de désordre choisie dans la partie (III) ( $\langle v^2 \rangle = \frac{W^2}{12}$ ), on obtient :

$$L_1 = \frac{96}{W^2} \quad (1.17)$$

### 1.3.3.B Corrections de conductance en localisation faible : $k.l \gg 1$

Dans le cas d'un désordre faible, l'effet des diffusions sur les impuretés peut se traiter par un développement diagrammatique perturbatif. Pour cela on considère la conductivité exprimée à l'aide de fonctions de Green retardée et avancée [91] (on surligne les quantités moyennée par le désordre). Le développement<sup>12</sup> de la moyenne du produit des fonctions de Green donne la conductivité de Drude  $\sigma_0$ , à l'ordre zéro.

$$\bar{\sigma} = \frac{e^2}{2\pi m^*2V} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \overline{\langle \nabla_{\vec{r}} G^R(\epsilon_f) \nabla_{\vec{r}'} G^A(\epsilon_f) \rangle} = \sigma_0 + \overline{\Delta\sigma} + \overline{\Delta^2\sigma} + \dots \quad (1.18)$$

En l'absence de couplage spin-orbite, les premières corrections quantiques à la conductivité sont pour un système de volume  $V = L^d$  [4] :

$$\overline{\Delta\sigma} = \begin{cases} -\frac{2e^2}{\pi\hbar} [L - l] & \text{pour } d = 1 \\ -\frac{2e^2}{\pi\hbar} \ln \left[ \frac{L}{l} \right] & \text{pour } d = 2 \\ -\frac{2e^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{1}{L} - \frac{1}{l} \right] & \text{pour } d = 3 \end{cases} \quad (1.19)$$

---

<sup>11</sup>  $i_0 = \sum_{i=1}^L i |\Psi(i)|^2$

<sup>12</sup> on développe à tous les ordres :

$$\overline{\langle \vec{k} | G^R(\epsilon_f) | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | G^A(\epsilon_f) | \vec{k} \rangle} = \overline{\langle \vec{k} | G^R(\epsilon_f) | \vec{k}' \rangle} \times \overline{\langle \vec{k}' | G^A(\epsilon_f) | \vec{k} \rangle} + (\text{ordres supérieurs})$$



où la taille  $L$  du système est comprise entre  $L_\Phi$  et  $l$ . De ces expressions, on peut tirer une estimation de la longueur de localisation en extrapolant la longueur pour laquelle on a  $|\Delta\sigma| = \sigma_0$ .

### 1.3.3.C Théorie d'échelle de la localisation

L'énergie de Thouless  $E_{th}$  d'un système de taille  $L$  est l'incertitude sur l'énergie des niveaux, associée au temps de diffusion dans ce système :  $E_{th} = D\hbar/L^2$ . Thouless définit la conductance  $g$  comme le rapport de l'énergie de Thouless  $E_{th}$  à l'espacement de niveaux d'énergie dans un hypercube de taille  $L$  [145]. Ce calcul suggère que la dépendance de  $g$  avec la taille  $L$  peut se traiter par une technique de renormalisation à la Wilson [158]. En considérant qu'un hypercube de côté  $aL$  se décompose en  $a^d$  cubes de côté  $L$ , on relie la conductance de l'hypercube avec celle des cubes par une fonction :  $g(aL) = f[a, g(L)]$ . Dans une version continue, on définit une fonction d'échelle [1] dépendant de la dimension  $d$  :

$$\beta_d(g) = \frac{d \ln(g)}{d \ln(L)} \quad (1.20)$$

On connaît le comportement asymptotique de cette fonction :

- Si  $g \gg 1$  on est dans le régime métallique où la loi d'Ohm est vérifiée :

$$g(L) = \sigma L^{d-2} \quad \text{d'où} \quad \beta_d(g) \underset{\ln g \rightarrow +\infty}{\sim} d - 2 \quad (1.21)$$

Le calcul de localisation faible, dans l'équation (1.19), nous donne la première correction à la conductance qui est universelle et négative. On approche donc la limite  $d - 2$  par valeurs négatives quand  $g$  tend vers l'infini.

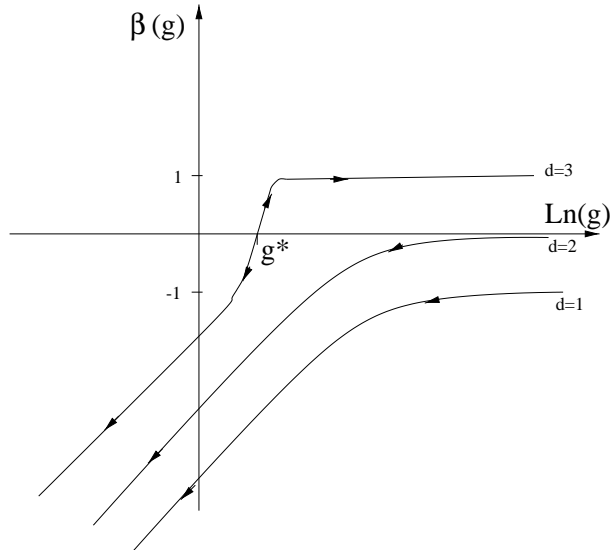


FIG. 1.7: Fonction d'échelle  $\beta(g)$

- Si  $0 < g \ll 1$  on est dans le régime isolant où  $g$  décroît exponentiellement :

$$g(L) = g_0 e^{-\frac{L}{L_1}} \quad \text{d'où} \quad \beta_d(g) \underset{\ln g \rightarrow -\infty}{\sim} -\frac{L}{L_1} = \ln \left( \frac{g}{g_0} \right) \quad (1.22)$$

En supposant que les fonctions  $\beta_d$  sont continues et monotones, “*puisque un couplage  $g$  plus petit signifie certainement toujours plus de localisation*”<sup>13</sup>, on déduit l’allure des fonctions  $\beta_d$  (voir 1.7) à partir des comportements asymptotiques.

Pour  $d \leq 2$  on a toujours  $\beta_d(g) < 0$  (du moins en l’absence de couplage spin-orbite). La conductance décroît toujours quand on augmente la taille du système. Le flot de l’équation de renormalisation amène donc tous les systèmes vers la limite localisée. Tous les systèmes sont donc isolant pour  $d \leq 2$ .

Pour  $d \geq 3$ , on a une transition métal-isolant avec trois comportements possibles :

- si  $g > g^*$  (pour une certaine taille donnée),  $\beta_d(g) > 0$ , la conductance augmente toujours quand on augmente la taille du système ce qui amène le système vers la limite métallique.
- si  $g < g^*$ , le flot de l’équation de renormalisation amène le système vers la limite isolant.
- si  $g = g^*$  on est à la transition métal-isolant et la conductance est invariante d’échelle.

Ces conclusions ne tiennent pas compte du fait que les interactions peuvent éventuellement remettre en question l’existence de ces fonctions ou du moins leur comportement. Finkelshtein a le premier suggéré la possibilité d’une phase métallique en dimension deux en l’absence de champ magnétique et en présence d’interactions [52]. Il calcule, par une méthode du groupe de renormalisation perturbative, l’effet combiné du désordre et des interactions et constate que le couplage des interactions diverge quand la température tend vers zéro et donc que la théorie s’effondre. Il constate aussi que la résistivité commence à croître avec la température au moment où la théorie s’effondre, ce qui est un signe du comportement métallique.

### 1.3.4 Différentes formes possibles d’un diagramme de phase

On résume ici les principales conclusions et les principales questions que nous apportent les études présentées dans les sections précédentes. A désordre nul, on a le diagramme de phase présenté dans la figure (1.8). Les traits en pointillés présentent les différentes frontières possibles ( $r_s^f$ ) avec la phase liquide à température nulle. Dans un cas (b) on a  $r_s^f = r_s^w$  et il n’y a qu’une seule transition de phase. Dans un cas (a) on a  $r_s^f < r_s^w$  et il existe une phase intermédiaire entre le solide et le liquide et donc deux transitions. On peut raisonnablement se demander si cette phase ne serait pas le prolongement de la phase hexatique à température nulle. Dans ce cas, cette phase aurait-elle un quelconque rapport avec la phase proposée par Andreev et Lifshitz et observée numériquement pour des bosons ?

En présence de désordre et à température nulle, les phases extrêmes du diagramme deviennent isolantes. On peut donc aussi s’interroger sur les propriétés de conduction de cette phase intermédiaire potentielle.

---

<sup>13</sup>phase extraite et traduite de [1]

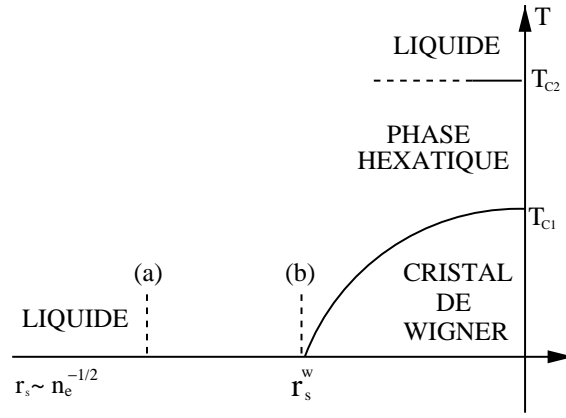


FIG. 1.8: Possible diagramme de phase température-densité

## 1.4 Magnétismes d'un gaz de particules

### 1.4.1 Magnétisme de spins - Couplage à un champs magnétique parallèle

Le magnétisme d'un gaz bidimensionnel de fermions n'est pas connu pour toutes les valeurs des paramètres d'énergie cinétique, d'interaction et de désordre. C'est encore un actif sujet de recherche. On pourra, pour une revue, consulter le livre d'Auerbach [9]. On présente dans cette section l'aimantation du gaz d'électrons, dans les deux limites de fortes et faibles densités où elle peut être comprise.

#### 1.4.1.A Interaction nulle - Effet du nombre de particules

A interaction nulle, les fonctions propres à N-corps sont des déterminants de Slater de fonctions propres à un-corps. On nomme  $|\alpha, \sigma\rangle$  l'états propres à un-corps d'énergie  $\epsilon_\alpha$  et de spin  $\sigma$ , on peut l'écrire en seconde quantification  $|\alpha, \sigma\rangle = d_{\alpha, \sigma}^+ |\emptyset\rangle$ . On construit les états à N-corps en remplissant  $N$  orbitales à un-corps  $|\alpha_i, \sigma_i\rangle_{(i=1,2,\dots,N)}$ .

$$\begin{aligned}
 |\{\alpha_i, \sigma_i\}\rangle &= \prod_i^N d_{\alpha_i, \sigma_i}^+ |\emptyset\rangle \\
 H|\{\alpha_i, \sigma_i\}\rangle &= \left( \sum_i^N \epsilon_{\alpha_i} \right) |\{\alpha_i, \sigma_i\}\rangle
 \end{aligned} \tag{1.23}$$

#### Magnétisme de l'état fondamental :

L'état fondamental se construit en remplissant les  $N$  orbitales de plus basses énergies. Compte tenu de la dégénérescence en spin des états à 1-corps et de la parité du nombre de particules, on trouve à l'énergie de Fermi soit une, soit deux particules, comme indiqué sur la figure (1.9).

Si  $\vec{z}$  est une direction arbitraire, alors l'état de spin est  $S_z = 0$  pour un nombre pair de particules et  $S_z = 1/2$  pour un nombre impair.

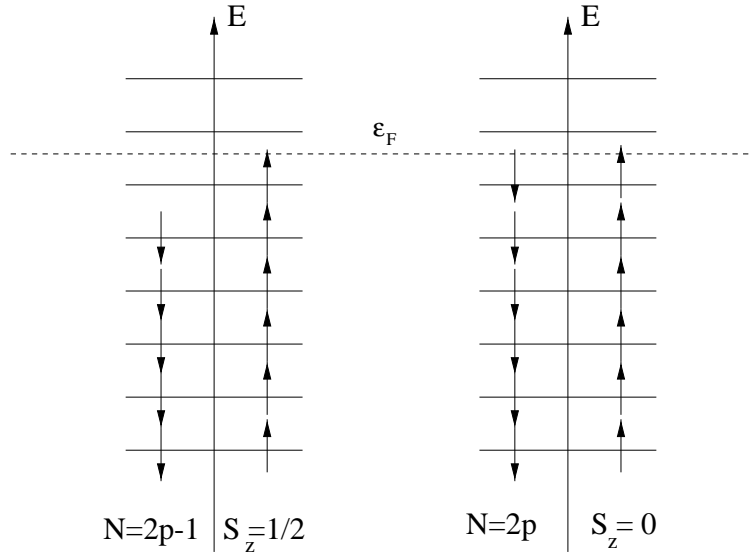


FIG. 1.9: Remplissage des orbitales à une particule pour une interaction nulle ( $U = 0$ ) pour un nombre pair et impair de particules.

### Compressibilité - Distribution bimodale :

Sans interaction on a donc un effet de la parité du nombre de particules. Pour voir cet effet, on étudie la compressibilité  $\kappa$ , qui mesure la facilité du système à accepter l'ajout d'une particule. Si  $E_0(N)$  est l'énergie fondamentale du système à  $N$ -corps, l'inverse de la compressibilité est défini par<sup>14</sup>,

$$\kappa^{-1}(N) = E_0(N+1) - 2E_0(N) + E_0(N-1) \quad (1.24)$$

Compte tenu de la dégénérescence en spin, on s'attend à pouvoir constater un effet de parité :

$$\kappa^{-1}(N) = \begin{cases} 0 & \text{si } N = 2p+1 \\ \epsilon_{p+1} - \epsilon_p \neq 0 & \text{si } N = 2p \end{cases} \quad (1.25)$$

Considérons la distribution<sup>15</sup>  $P$  de la variable  $s = \kappa^{-1} / \langle \kappa^{-1} \rangle$ . On doit obtenir une distribution bimodale : les valeurs de  $N$  impaires amènent un pic en  $s = 0$  et les valeurs de  $N$  paires amènent une distribution correspondant aux écarts de niveaux consécutifs ( $\epsilon_{p+1} - \epsilon_p$ ). Pour un système diffusif, cette distribution est celle de Wigner-Dyson que l'on présentera plus complètement dans le chapitre (3.3). Les mesures expérimentales, faites sur des boîtes quantiques en régime de blocage de Coulomb, permettent de visualiser  $P(s)$ . L'absence parfois observée [141] de distribution bimodale met donc en évidence l'importance des interactions dans ces systèmes et notamment du processus de Stoner que l'on développe dans le paragraphe suivant.

<sup>14</sup>C'est une forme discrète de la formule  $\kappa^{-1} \propto \frac{\partial^2 E}{\partial N^2}$

<sup>15</sup>Les crochets dénotent une moyenne sur le nombre de particules et donc sur le nombre de niveaux d'énergie remplis.

### 1.4.1.B Interactions faibles - Instabilité de Stoner

Deux mécanismes rentrent en compétition à faible interaction. Sans interaction, on remplit les orbitales à une particule (données par les terme cinétique et de désordre) avec des particules de spins opposés, ce qui tend à minimiser l'aimantation. D'autre part, l'interaction Coulombienne tend à minimiser le recouvrement des orbitales à une particule et favorise les fonctions d'ondes spatiales totalement antisymétriques. La fonction d'onde de spin doit être alors totalement symétrique (spin ferro), pour que la fonction d'onde totale soit antisymétrique. En augmentant la force de l'interaction, on obtient donc une instabilité de spin dont on peut estimer le seuil d'apparition  $U_c$  en suivant l'article de Stoner dans l'approximation d'Hartree<sup>16</sup> pour le hamiltonien d'Hubbard :

$$H = -t \sum_{\langle i,i' \rangle} \sum_{\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i',\sigma} + W \sum_{i,\sigma} v_i \hat{n}_{i,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (1.26)$$

#### Approximation d'Hartree-Fock :

L'approximation Hartree-Fock ( $HF$ ) est une approximation de champ moyen. Dans la base des états d'Hartree-Fock, qui sont des combinaison de déterminants de Slater d'états à une particule  $|\alpha\rangle = d_{\alpha}^+ |\emptyset\rangle$ , on écrit le hamiltonien sous la forme :

$$\begin{aligned} H^{HF} &= \sum_{\alpha,\sigma} \epsilon_{\alpha} n_{\alpha,\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\alpha,\beta,\sigma} \left( \sum_i |\alpha(i)|^2 |\beta(i)|^2 \right) n_{\alpha,\sigma} < n_{\beta,-\sigma} > \text{ soit} \\ H^{HF} &= \sum_{\alpha,\sigma} \tilde{\epsilon}_{\alpha,\sigma} n_{\alpha,\sigma} \text{ avec} \\ \tilde{\epsilon}_{\alpha,\sigma} &= \epsilon_{\alpha} + \frac{U}{2} \sum_{\beta} \left( \sum_i |\alpha(i)|^2 |\beta(i)|^2 \right) < n_{\beta,-\sigma} > \end{aligned} \quad (1.27)$$

$\epsilon_{\alpha}$  étant les valeur propres à une particule et  $n_{\alpha,\sigma} = d_{\alpha,\sigma}^+ d_{\alpha,\sigma}$  les opérateurs nombre d'occupation des orbitales Hartree-Fock.

En remplissant les orbitales  $HF$  de plus basse énergie, avec des particules avec spin, et ce jusqu'au niveau de Fermi  $\epsilon_F$ , on obtient un fondamental non-magnétique (1.10) dont la distribution est la suivante :

$$\langle n_{\alpha\sigma} \rangle = \begin{cases} 1 & \text{if } \epsilon_{\alpha\sigma} < \epsilon_F \\ 0 & \text{if } \epsilon_{\alpha\sigma} > \epsilon_F, \end{cases} \quad (1.28)$$

L'énergie totale  $HF$  de l'état fondamental se décompose en une partie correspondant à la somme des énergies à une particule et une partie correspondant à l'interaction entre les particules. La distribution  $\langle n_{\alpha\sigma} \rangle$  minimisant cette énergie donne la meilleur approximation de

---

<sup>16</sup>Pour une interaction d'Hubbard locale, il n'y a pas de terme d'échange de Fock.

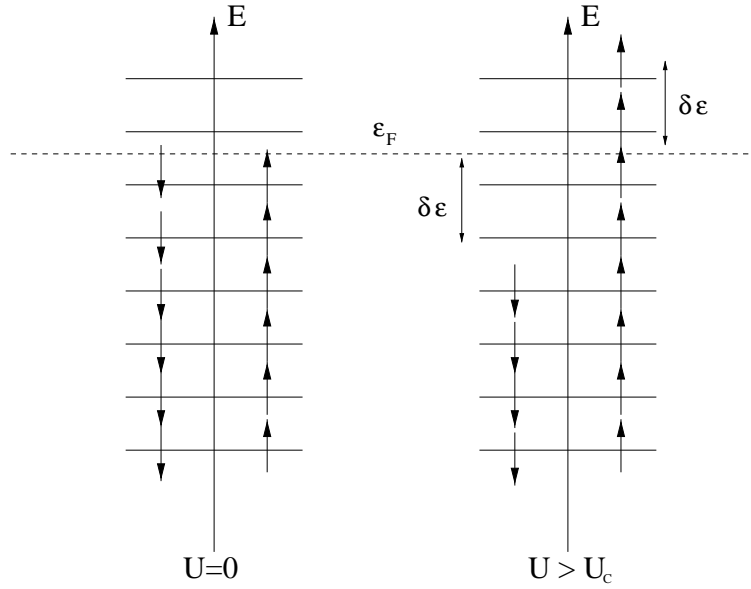


FIG. 1.10: Remplissage des orbitales à une particule pour une force de l'interaction inférieure au seuil de Stoner  $U_c$  (à gauche), puis pour  $U > U_c$  (à droite)

l'état fondamental par des déterminants de Slater.

$$E_0^{HF} = \sum_{\alpha\sigma} \epsilon_{\alpha} \langle n_{\alpha,\sigma} \rangle + U \sum_{\alpha,\beta} \left( \sum_i |\alpha(i)|^2 |\beta(i)|^2 \right) \langle n_{\beta,\downarrow} \rangle \langle n_{\alpha,\uparrow} \rangle = E_{1p} + E_U \quad (1.29)$$

### Stabilité de l'état non-magnétique :

Pour étudier la stabilité de l'état non-magnétique, on dépeuple les états de spin 'down' sur une couche en énergie d'épaisseur  $\delta\epsilon$  en dessous du niveau de Fermi et avec les électrons libérés, on peuple les états de spin 'up' sur une épaisseur  $\delta\epsilon$  au dessus du niveau de Fermi (figure(1.10)). Si on appelle  $\rho(\epsilon_F) = \frac{1}{V} \frac{dN_e}{d\epsilon}$  la densité d'états volumique au niveau de Fermi, le nombre d'électrons par unité de volume ayant changé de spin est  $\delta n_e = \rho(\epsilon_F) \delta\epsilon$ . Le changement d'énergie à une particule par unité de volume est  $(V^{-1} \delta E_{1p}) = \delta n_e \delta\epsilon = \rho(\epsilon_F) (\delta\epsilon)^2$ . Le changement d'énergie d'interaction dépend des couplages  $Q_{\alpha\beta}^{\alpha\beta} = \sum_i U |\alpha(i)|^2 |\beta(i)|^2$ . Dans le cas sans désordre, on a  $\alpha(j) = \exp(ik_{\alpha}j)/\sqrt{V}$  et tous les couplages sont alors égaux à  $U/V$ . On peut dans ce cas écrire  $E_U = \frac{U}{V} \sum_{\alpha} \langle n_{\alpha,\uparrow} \rangle \sum_{\beta} \langle n_{\beta,\downarrow} \rangle = \frac{U}{V} N_{\uparrow} N_{\downarrow}$ . Si  $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$  est le nombre total d'électrons, on obtient alors que le changement d'énergie d'interaction par unité de volume vaut :

$$V^{-1} \delta E_U = U \left( \frac{N}{2V} + \delta n_e \right) \left( \frac{N}{2V} - \delta n_e \right) - U \left( \frac{N}{2V} \right)^2 = -U \rho^2(\epsilon_F) (\delta\epsilon)^2 \quad (1.30)$$

L'état non-magnétique devient donc instable dès que  $\delta E_{1p} + \delta E_U < 0$ , ce qui définit le critère de Stoner :

$$U \rho(\epsilon_F) > 1 \text{ soit } U_c = (\rho(\epsilon_F))^{-1} \quad (1.31)$$

En présence de désordre et en première approximation, les couplages sont égaux à leur valeur moyenne sur le désordre  $Q_{\alpha\beta}^{\alpha\beta} = U\overline{Q}$ . Dans ce cas l'énergie d'interaction est  $E_U \equiv U\overline{Q}N_{\uparrow}N_{\downarrow} = U_{eff}N_{\uparrow}N_{\downarrow}$  et le critère de Stoner devient :  $U_{eff}\rho(\epsilon_F) > 1$ . Dans le régime diffusif, ces couplages sont augmentés par le désordre ( $U_{eff} > U$ ). Le système s'aimante donc pour une force des interactions plus petite que dans le cas sans désordre.

#### 1.4.1.C Interactions fortes - Magnétisme du cristal de Wigner

Comme nous l'avons vu précédemment, pour une interaction forte, les  $N$  particules sont localisées sur les sites d'un réseau cristallins. A une interaction infinie, on peut même considérer ces particules comme discernables. Le fondamental est alors dégénéré, chaque état correspondant à une façon de mettre les  $N$  particules sur les  $N$  sites.

Pour une interaction forte mais finie, la localisation n'est plus parfaite et les états localisés sur sites possèdent des recouvrements entre eux. Il est alors possible pour deux ou plusieurs particules de permuter leur positions par effet tunnel. Ceci lève la dégénérescence des états, qui forment alors la bande de plus basse énergie du spectre du système. Thouless montre que cette bande peut-être décrite simplement par un hamiltonien effectif à l'aide des permutations  $P$  sur les sites du réseau cristallin [144](voir aussi le paragraphe (4.3)) :

$$H_{eff} = - \sum_{P \in S_N} J_P (P + P^{-1}) \quad (1.32)$$

Si on considère maintenant un ensemble de fermions de spins  $\frac{1}{2}$  : une permutation  $P_F$  dans l'espace de Fock se décompose en une permutation  $P$  dans l'espace des sites et en une permutation associée  $P_s(P)$  dans l'espace des spin, de telle manière que les fonctions d'ondes  $|\Psi\rangle$  soient antisymétriques :

$$P_F|\Psi\rangle = [P \otimes P_s(P)]|\Psi\rangle = \epsilon(P)|\Psi\rangle \Leftrightarrow [P \otimes \mathbb{I}] = \epsilon(P)[\mathbb{I} \otimes P_s^{-1}(P)]$$

où  $\epsilon(P)$  est la signature de la permutation  $P$ , avec  $\epsilon(P) = (-1)^n$  si  $n$  est le nombre de transpositions nécessaires à la décomposition de  $P$  en produit de transpositions. Nous pouvons donc réécrire l'hamiltonien uniquement avec des opérateurs  $P_s$  agissant dans l'espace des spins :

$$H_{eff} = - \sum_{P \in S_n} J_P \epsilon(P) [P_s^{-1}(P) + P_s(P)] \quad (1.33)$$

De manière intuitive, on peut déduire que plus la permutation  $P$  met en oeuvre un nombre élevé de particules, plus la probabilité que cette permutation s'effectue par effet tunnel diminue ( $J_P \rightarrow 0$ ). Les contributions principales viennent de processus possédant des particules proches et en petit nombre. Ce sont les permutations cycliques notées  $P_{ijk\dots}$ , si  $(i,j,k,\dots)$  sont des sites contiguës. Les permutations sur les particules de spin- $\frac{1}{2}$  s'écrivent sous forme de produits d'opérateurs de spin. On a par exemple :

$$\begin{aligned} P_{ij} &= 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{2} \\ P_{ijk} + P_{kji} &= P_{ij} + P_{jk} + P_{ki} - 1 \end{aligned}$$

Le hamiltonien se développe alors sous la forme :

$$H_{eff} = \sum_{i < j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{i < j, k < l} J_{ijkl} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) (\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l) \quad (1.34)$$

Si on ne considère que les couples  $\langle i, j \rangle$  plus proches voisins et les permutations à deux et trois corps (on se restreint alors au premier terme du hamiltonien), on obtient un hamiltonien classique d'Heisenberg  $H_{eff} = J \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  qui est soit ferromagnétique soit antiferromagnétique<sup>17</sup> selon que  $J < 0$  ou  $J > 0$ .

Dans la phase cristal classique ( $r_s > 100$ ), on utilise un calcul Monte-Carlo pour calculer les fréquences d'échange ( $J_2, J_3, \text{etc.}$ ). Il semblerait [19] que le ferromagnétisme l'emporte dans le cristal conformément aux calculs WKB effectué par Roger [116]. Si on considère de plus que le système est désordonné, on peut obtenir des phases verre de spins.

### 1.4.2 Magnétisme orbital - Courants Permanents

On s'intéresse dans ce paragraphe au courant permanent engendré par un flux magnétique constant à travers un circuit fermé. En présence d'un champ magnétique extérieur  $\vec{B}$ , le hamiltonien du système se déduit, de celui sans champ, par la substitution  $\vec{P} \rightarrow \vec{P} - e\vec{A}$ , où  $\vec{A}$  est le potentiel vecteur dont dérive<sup>18</sup>  $\vec{B}$ .

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i (\vec{P}_i - e\vec{A}(\vec{r}_i))^2 + H_V + H_U \quad (1.35)$$

Le potentiel vecteur est en fait défini à un gradient près et toutes les observables physiques sont invariantes par une transformation de jauge  $U : \vec{A} \xrightarrow{U} \vec{A} + \vec{\nabla} f$ .

Si on a un conducteur unidimensionnel fermé  $C$  délimitant une surface  $S$ , le flux magnétique  $\Phi$  est défini par :

$$\Phi = \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (1.36)$$

Le flux  $\Phi$  est donc un invariant de jauge<sup>19</sup> (contrairement  $\vec{A}$ ) et est donc un paramètre du problème.

On considère, comme sur la figure (1.11), un anneau unidimensionnel traversé par un champ magnétique uniforme perpendiculaire à l'anneau engendrant un flux  $\Phi$ . Pour un anneau circulaire de longueur  $L$ , on pourra faire le choix de jauge :  $\vec{A} = (\Phi/L)\vec{e}_\theta$ . Les propriétés du système se déduisent alors du cas sans champ par la substitution :

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \frac{e\Phi}{L\hbar} \vec{e}_\theta = \vec{k} - \frac{2\pi}{L} \frac{\Phi}{\Phi_0} \vec{e}_\theta \quad \text{avec} \quad \Phi_0 = \frac{h}{e} \quad (1.37)$$

où  $\Phi_0$  est appelé quantum de flux.

---

<sup>17</sup> les permutation à deux et trois corps ont des contributions dans  $J$  de signes différents car  $\epsilon(P_{ij}) = -1$  et  $\epsilon(P_{ijk}) = +1$ .

<sup>18</sup>  $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$

<sup>19</sup> En effet  $\oint_C \vec{\nabla} f \cdot d\vec{l} = 0$ .



### Problèmes 1D équivalents par changement de jauge :

On considère toujours  $N$  particules sur un anneau unidimensionnel de périmètre  $L$  traversé par un flux  $\Phi$ . En présence de désordre et d'interactions, le hamiltonien du système est celui donné par l'équation (1.35). Du fait de la géométrie annulaire, les conditions aux bords sont périodiques pour les fonctions d'onde :

$$\Psi(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N) = \Psi(l_1, \dots, l_i + L, \dots, l_N), \quad \forall i \quad (1.38)$$

avec  $l_i$  abscisse curviligne sur l'anneau de la  $i^{\text{ème}}$  particule. Le problème étant invariant sous transformation de jauge, Byers et Yang [29] montrent qu'il se ramène au problème sans champ avec des conditions aux bords dépendant explicitement du flux :

$$\begin{cases} \left( \frac{1}{2m} \sum_i \vec{P}_i^2 + H_V + H_U \right) \Psi' = E \Psi' \\ \Psi'(l_1, \dots, l_i + L, \dots, l_N) = \Psi'(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N) e^{i2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}}, \quad \forall i \end{cases} \quad (1.39)$$

Pour cela ils utilisent la transformation de jauge suivante, où  $f$  est défini par  $\vec{\nabla} f = \vec{A}$ ,

$$\Psi'(l_1, \dots, l_i + L, \dots, l_N) = \Psi(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N) e^{\frac{i2\pi}{\Phi_0} \sum_j f(l_j)} \quad (1.40)$$

Considérant alors le problème donné par les équations (1.39), ils déduisent que toutes les propriétés physiques sont périodiques en flux, de période  $\Phi_0$ . De plus si  $H_V$  et  $H_U$  sont réels, en prenant le conjugué des équations, on obtient que les niveaux d'énergie sont des fonctions paires de  $\Phi$ . Dans le cas d'un système non strictement unidimensionnel, le résultat reste valable si le rayon cyclotron donné par le champ magnétique reste très grand devant toutes les autres longueurs transverses : la section du conducteur et le libre parcours moyen. Les degrés de liberté dans la section transverse se découpent de ceux dans la direction du flux.

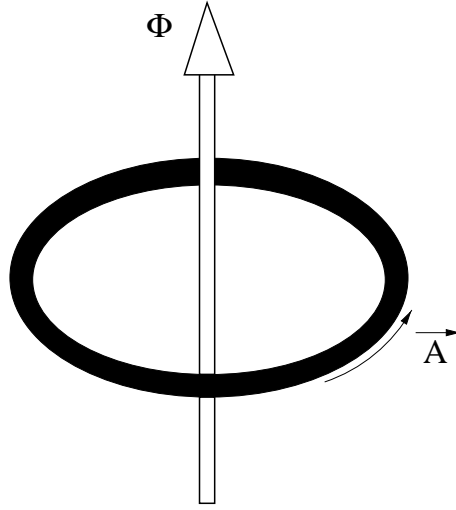
Le problème d'un système fermé traversé par un flux a été changé en celui d'un système fermé avec des conditions aux bords non-périodiques. La sensibilité d'un système aux changements de conditions de bord est étroitement liée à l'extension spatiale des états propres du système et donc à ses propriétés de conduction [71, 145].

#### 1.4.2.A cas unidimensionnel sans interaction et sans désordre

En l'absence de désordre et d'interactions ( $H_V + H_U = 0$ ) on a ( $\{k = \frac{2\pi}{L}m; m \in \mathbb{Z}\}$ ). La substitution (1.37) donne pour la dépendance de l'énergie du  $m$ -ième niveau

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{2\pi}{L} \right) \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \quad (1.41)$$

Cette dépendance est parabolique en flux. Si on rajoute à ce flux, un nombre entier de quanta de flux  $\{p\Phi_0; p \in \mathbb{Z}\}$ , alors le spectre global est inchangé. L'énergie est donc périodique de période  $\Phi_0$ .

FIG. 1.11: Flux  $\Phi$  à travers un anneau

On a une symétrie dans les expressions lorsque l'on échange  $k \leftrightarrow \frac{2\pi}{L} \frac{\Phi}{\Phi_0}$ , et donc de même que le courant est proportionnel à  $\frac{\partial E}{\partial k}$ , le courant généré par le flux  $\Phi$  est défini<sup>20</sup> par :

$$I(\Phi) = -\frac{\partial E[\Phi]}{\partial \Phi} \quad (1.42)$$

On oriente l'anneau, et la surface qu'il entoure, suivant le champ magnétique  $\vec{B}$  le traversant. Quand  $I > 0$  on dit que le courant est paramagnétique<sup>21</sup> et dans le cas contraire, on dit que le courant est diamagnétique.

### Signe du courant sans interaction et sans désordre

On a tracé dans la figure (1.12) les dépendances des niveaux d'énergie en  $\Phi$ , pour le problème unidimensionnel sans désordre ni interaction. De par la périodicité en  $\Phi_0$ , on se restreint à l'intervalle  $[-\Phi_0/2; \Phi_0/2]$ . Le courant permanent, si on a  $N$  particules, s'obtient en sommant les contributions au courant de chaque état occupé. Etant donné que les énergies, pour deux états consécutifs, ont des pentes de signes opposés, leurs apports en courant se compensent. Ainsi le courant total est de l'ordre du courant du dernier niveau rempli.

$$I(\Phi > 0, N) = \begin{cases} \sum_{m=-p}^{p-1} -\frac{\partial e_m}{\partial \Phi} = -\frac{N\hbar e}{m^* L^2} \left( \frac{\Phi}{\Phi_0} - \frac{1}{2} \right) & \text{si } N = 2p \\ \sum_{m=-p}^p -\frac{\partial e_m}{\partial \Phi} = -\frac{N\hbar e}{m^* L^2} \frac{\Phi}{\Phi_0} & \text{si } N = 2p + 1 \end{cases} \quad (1.43)$$

Le signe du courant dépend donc explicitement de la parité du nombre de particules et d'après l'équation (1.43), on a  $\text{signe}(I) = (-1)^N$ . En présence de désordre, les dégénérescences aux croisements de niveaux de la figure (1.12) sont levées, ce qui arrondit les courbes et donc diminue le courant en amplitude. Toutefois les courants gardent un signe alterné et la règle du

<sup>20</sup>  $I$  est bien homogène à un courant car si  $M$  est l'aimantation engendrée par le courant dans l'anneau de surface  $S$ , alors  $I = \frac{M}{S} = \frac{-1}{S} \frac{\partial E}{\partial B}$  et  $\Phi = BS$ .

<sup>21</sup> car l'aimantation  $\vec{M}$  créée par le courant a la même direction et le même sens que  $\vec{B}$

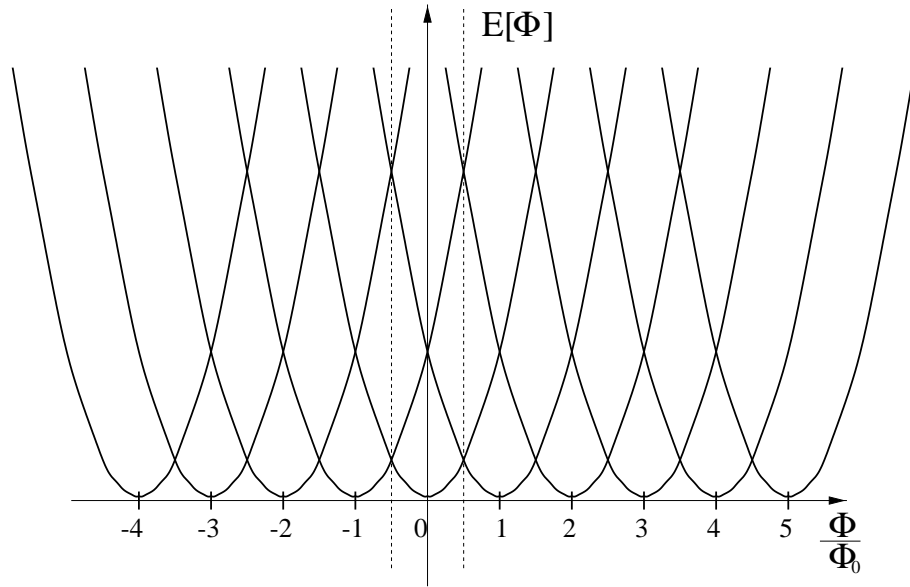


FIG. 1.12: Dépendance de l'énergie en le flux pour un système unidimensionnel sans désordre et sans interaction.

signe, dépendant du nombre de particules, demeure. Une moyenne, sur un ensemble canonique d'anneaux, montre que le courant moyen est alors paramagnétique [24].

En présence d'interaction, la structure de bande peut être fortement modifiée avec la possible apparition d'extrema locaux [103] entre les flux  $\Phi = 0$  et  $\Phi = \Phi_0/2$ , qui auraient pour effet de changer le signe du courant. Toutefois Legett montre que pour un système unidimensionnel, on peut en partie retrouver une règle pour le signe du courant même lorsque l'on est en présence d'interactions [83].

#### 1.4.2.B Théorème de Legett pour des fermions sans spin à 1D : cas avec interaction et désordre

Nous développons dans ce paragraphe, l'argument de Legett pour le signe du courant d'un système de  $N$  fermions sans spin en présence de désordre et d'interaction. C'est un argument variationnel dont le but est de majorer l'énergie du système à un flux  $\Phi$  quelconque, par l'énergie des systèmes à  $\Phi = 0$  ou  $\Phi = \Phi_0/2$ .

##### • Symétrie imposée et fonction d'onde variationnelle

Après transformation de jauge, on se ramène au problème donné par les équations (1.39) qui imposent une condition de bords avec flux sur la fonction d'onde. De plus les particules étant des fermions, on a une condition d'antisymétrie sous l'échange de deux fermions :

$$\Psi'(l_1, \dots, l_i, \dots, l_j, \dots, l_N) = -\Psi'(l_1, \dots, l_j, \dots, l_i, \dots, l_N), \quad \forall i, j \quad (1.44)$$

On appelle  $\Psi_0^{(\Phi)}$  la solution du problème pour un flux  $\Phi$ . On se place dans le cas où  $N$  est pair, on construit alors la fonction d'onde variationnelle à l'aide de la solution du problème

sans flux :

$$\psi_{var}(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N) = \Psi_0^{(0)}(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N) e^{[i2\pi\xi(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N)]} \quad (1.45)$$

et pour satisfaire aux conditions de bords avec flux, on doit avoir pour la fonction  $\xi$  :

$$\xi(l_1, \dots, l_i + L, \dots, l_N) = \xi(l_1, \dots, l_i, \dots, l_N) + \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad \forall i$$

Calculons la différence de l'énergie de cette fonction d'onde  $\psi_{var}$  avec l'énergie de la fonction d'onde de l'état fondamental du problème sans flux  $\Psi_0^{(0)}$ . On note cette différence d'énergie  $\Delta E = E_{var} - E(\Phi = 0)$ . On la décompose en trois contributions  $\Delta E = \Delta E_K + \Delta E_V + \Delta E_U$  provenant de l'énergie cinétique, de désordre et des interactions. Les contributions de l'énergie potentielle et des énergies d'interactions ne dépendent que du module de la fonction d'onde. Pour notre choix,  $|\psi_{var}|^2 = |\Psi_0^{(0)}|^2$ , on obtient donc que  $\Delta E_V + \Delta E_U = 0$ . La différence provient donc uniquement de l'énergie cinétique, qui donne une contribution identique quelle que soit la particule  $i$ . On obtient donc en choisissant  $l_1$  comme paramètre :

$$\Delta E = E_{var} - E(\Phi = 0) = N \int_0^L |\Psi_0^{(0)}|^2 |\nabla_{l_1} \xi|^2 dl_1$$

#### • Existence de noeuds sans symétrie imposée

On cherche un moyen d'obtenir  $\Delta E = 0$ . Une méthode est de choisir  $\xi(l_1)$  sous la forme d'une fonction de Heaviside  $\xi(l_1) = \frac{\Phi}{\Phi_0} \Theta(l_1 - \tilde{l})$  avec  $\tilde{l}$  tel que  $\Psi_0^{(0)}(l_1 = \tilde{l}) = 0$ . Avec ce choix, on impose un saut de phase en  $\tilde{l}$ . La fonction  $\Psi_0^{(0)}(l_1)$  s'annule pour  $l_1 = l_j$  avec  $j \neq 1$ , mais ce sont des noeuds avec symétrie imposée. On ne peut donc pas y placer un saut de phase et on ne peut prendre  $\tilde{l} = l_j$ . Toutefois, il existe d'autres noeuds de la fonction d'onde où il n'y a pas de symétrie imposée. En effet, quand on varie  $l_1$  de 0 à  $L$ , on traverse les  $N - 1$  ( $N$  est pair) autres particules où la fonction d'onde s'annule en changeant de signe. Aussi, s'il n'y avait pas d'autre noeud, on ne pourrait satisfaire à la condition de bord à la fin du tour, puisque  $(-1)^{N-1} = -1$ . On a donc traversé un autre zéro de la fonction d'onde où l'on peut placer le saut de phase. On a donc construit une fonction d'onde variationnelle telle que  $E_{var} = E(0)$ . Comme l'énergie d'une fonction d'onde variationnelle majore toujours l'énergie fondamentale, on obtient :

$$E(\Phi) \leq E_{var} = E(0) \quad \forall \Phi \text{ pour } N \text{ pair} \quad (1.46)$$

Un argument similaire pour un nombre impair de fermions, utilisant une fonction d'onde variationnelle construite à partir de  $\Psi_0^{(\Phi_0/2)}$ , donne la majoration suivante :

$$E(\Phi) \leq E_{var} = E(\Phi_0/2) \quad \forall \Phi \text{ pour } N \text{ impair} \quad (1.47)$$

#### • Théorème de Legett et discussion sur la dimension deux

Le résultat obtenu est donc que le courant est paramagnétique au voisinage de  $\Phi = 0$  pour  $N$  pair et diamagnétique au voisinage de  $\Phi = \Phi_0/2$  pour  $N$  impair. De plus si l'énergie n'admet pas d'extrema locaux entre 0 et  $\Phi_0/2$ , alors les résultats sont vrais sur tout l'intervalle

$[-\Phi_0/2; \Phi_0/2]$ . La sensibilité de phase  $D$  se définit comme la variation de l'énergie du fondamental lorsque l'on passe des conditions de bords périodiques  $\Phi = 0$  aux conditions de bords anti-périodiques  $\Phi = \Phi_0/2$ . Elle est reliée aux propriétés de transport du système [145] et le théorème de Legett nous dit donc que :

$$\text{signe} \left[ D = E(0) - E(\Phi_0/2) = \int_0^{\Phi_0/2} I(\Phi) d\Phi \right] = (-1)^N \forall N \quad (1.48)$$

Ce résultat ne peut se généraliser au cas bidimensionnel, car la structure des noeuds de la fonction d'onde n'est pas connue et il est possible de suivre un chemin faisant le tour du flux sans traverser de surface nodale. On verra toutefois que ce résultat peut, en partie, être étendu à très forte interaction et dans un modèle sur réseau dans le chapitre(4).

### 1.4.3 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté quelques résultats connus sur le gaz bidimensionnel. Nous avons décrit les phases extrêmes en densité que sont le cristal de Wigner désordonné et le verre de Fermi. Le cristal de Wigner fond à un seuil  $r_s^w$ , mais le mécanisme de fusion reste obscure. Cette fusion donne-t-elle le verre de Fermi immédiatement ( $r_s^f = r_s^w$ ) ou bien a-t-on une phase intermédiaire ( $r_s^f < r_s^w$ ) correspondant à la phase hexatique en température ?

Nous avons décrit le comportement magnétique du gaz qui lui aussi est obscure, puisque l'on ne connaît pas le magnétisme du cristal de Wigner. Nous avons aussi abordé le problème du signe du courant permanent en dimension deux. Toutes ces questions non-résolues seront rencontrées au cours de cette thèse, où l'on étudie numériquement un système d'électrons fortement corrélés.

Le chapitre suivant présente les signatures d'une transition quantique Isolant-Métal en dimension deux pour des échantillons dilués. Ces résultats semblent étonnants puisque l'on a présenté dans ce chapitre la théorie d'échelle de la localisation, qui stipule qu'il n'y a pas de métal en dimension deux sans interaction. Les phases extrêmes du diagramme de phase étant toutes les deux isolantes, ces expériences appuieraient l'idée de l'existence d'une phase intermédiaire entre le verre de Fermi et le cristal de Wigner.



# Chapitre 2

## Expériences dans des gaz bidimensionnels dilués

---

On présente dans ce chapitre les expériences montrant une transition Isolant-Métal inattendue dans les gaz bidimensionnels. On présente également les signatures magnétiques de cette transition. En guise de conclusion, on résumera les questions encore en suspens pour le gaz bidimensionnel.

### 2.1 Présentation des différents systèmes expérimentaux

#### Gaz 2D dans des systèmes à effet de champ

On a vu dans le chapitre (1.2) que l'on peut obtenir un gaz bidimensionnel d'électrons (2DEG) à la surface de l'Hélium. Il semble toutefois difficile d'augmenter suffisamment la densité électronique, de manière à pouvoir explorer le régime quantique, sans déstabiliser le système {Hélium+électrons}. En physique du solide, les cuprates forment une nouvelle classe de supraconducteurs dont le mouvement des charges est principalement bidimensionnel, où la densité de charge  $n_e$  est fixée par dopage chimique.

D'autres gaz bidimensionnels d'électrons ou de trous (2DHG) peuvent aussi être créés à l'interface entre deux matériaux comme par exemple :

- Entre deux semi-conducteurs, comme les hétérostructures GaAs/AlGaAs dopées p ou n.
- A l'interface entre un semi-conducteur et un isolant, comme c'est le cas dans les Si-MOSFET.
- Et comme dans les expériences très récentes de Batlogg *et al* [119], à l'interface entre un cristal organique (pentacène, tetracène et anthracène) et un isolant.

Dans les systèmes décrits ci-dessus, la présence d'une grille permet de varier la densité électronique du gaz, et ainsi de passer de la limite basse densité à la limite haute densité. On résume dans la figure (2.1) les différents comportements observés par deux de ces systèmes, lorsque l'on varie la densité  $n_e$ .

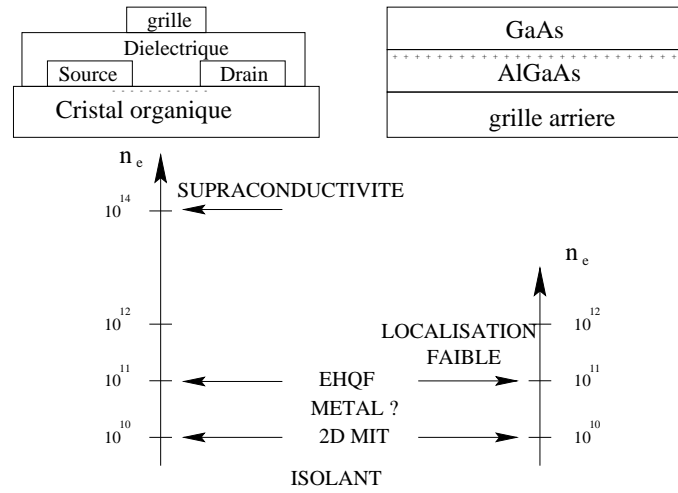


FIG. 2.1: Schéma d'un transistor à effet de champ organique (en haut à gauche) et d'une hétérostructure à l'arséniure de gallium (en haut à droite). Les électrons sont symbolisés par des signes moins (-) et les trous des symboles (+). On note sur les échelles de densité  $n_e$  (en électrons/cm<sup>2</sup>), les densités typiques (qui dépendent de la masse effective des porteurs) auxquelles ont été observés ([62, 119–121]) les différents comportements du gaz. L'Effet Hall Quantique Fractionnaire est noté (EHQF).

### Rappel sur le comportement de la résistivité dans un métal

La conductivité d'un métal est finie à température nulle car elle est limitée par les collisions des porteurs sur les impuretés. Elle est alors donnée classiquement par la formule de Drude. Pour un isolant la conductivité est nulle à température nulle. Le tenseur de résistivité  $\rho$  est défini comme le tenseur inverse de celui de conductivité. Pour un isolant la résistivité doit donc diverger à température nulle, et par conséquent la résistivité doit décroître lorsque la température augmente comme cela est montré dans la figure (2.2). On aura donc à suffisamment basse température pour un isolant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{T \rightarrow 0} < 0 \quad (2.1)$$

## 2.2 La transition métal-isolant en dimension deux

D'après la théorie d'échelle de la localisation d'Abrahams *et al* [1] que l'on a présentée dans la section (1.3.3), il ne peut pas y avoir de phase métallique en dimension deux sans interaction. Ainsi la résistivité des échantillons doit toujours diverger vers l'infini lorsque la température tend vers zéro. Cependant de nombreuses expériences viennent remettre en cause cette vision depuis la moitié des années 90. On observe en effet une transition Isolant-Métal (TMI) et un comportement métallique de la résistivité dans toutes sortes d'échantillons bidimensionnels à des densités électroniques de l'ordre de 10<sup>10</sup> électrons par cm<sup>2</sup> (voir figure (2.1)). On présente



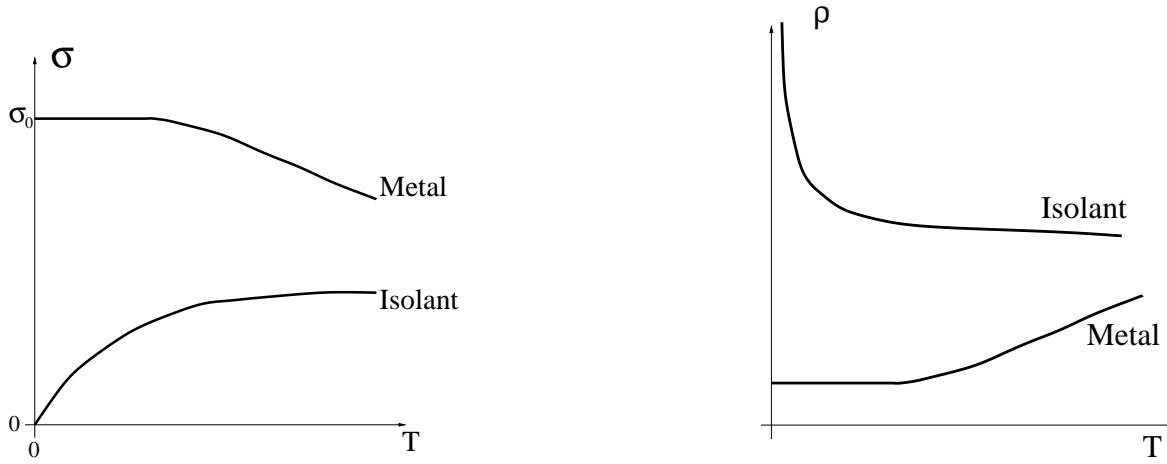


FIG. 2.2: Variation de la conductivité et de la résistivité en fonction de la température autour de  $T = 0$  pour un métal et un isolant.

dans cette section les principaux résultats expérimentaux concernant cette transition. On pourra, pour une revue plus approfondie des faits expérimentaux concernant la TMI, consulter l'article d'Abrahams *et al* [45].

### 2.2.1 Les mesures de résistivité

Les premières expériences montrant une variation atypique de la résistivité avec la température sont dues à Kravchenko *et al* [75, 76], qui utilisent des échantillons de Si-MOSFET de hautes mobilités. Ces observations ont ensuite été confirmées par des expériences faites par d'autres groupes sur des Si-MOSFET de géométries différentes (Popovic *et al* [108]), puis sur d'autres types de matériaux comme les hétérostructures SiGe ou GaAs/AlGaAs dopés-p( [39] [78] [62] [135] [159] [97]). Enfin ce phénomène a aussi été vu sur les hétérostructures AlAs ou GaAs/AlGaAs dopés-n( [102] [64]). On présente dans la figure (2.3) la variation de la résistivité avec la température dans différents types de gaz bidimensionnels. On constate qu'au delà d'une certaine densité, la résistivité croît avec la température, ce qui est caractéristique d'un comportement métallique. Toutefois cette interprétation ne fait pas l'unanimité.

#### Quelques arguments en faveur d'une transition Isolant-Métal :

Les résultats de ces expériences allant à l'encontre des théories [1] acceptées et bien vérifiées jusque là, il est légitime de s'interroger sur la réalité de cette transition. Pour cette raison, dans de nombreux articles, cette transition est qualifiée de "possible, apparente ou encore probable". On énumère donc dans ce qui suit, quelques arguments en faveur du fait que cette transition est réelle.

- Un changement dans le signe de la pente de la résistivité est aussi observé au niveau d'autres transitions. Ce changement sert couramment à repérer ces transitions. C'est notamment le cas pour des transitions métal-isolant en dimension trois [117] mais aussi pour des transitions supraconducteur-isolant [65, 86].

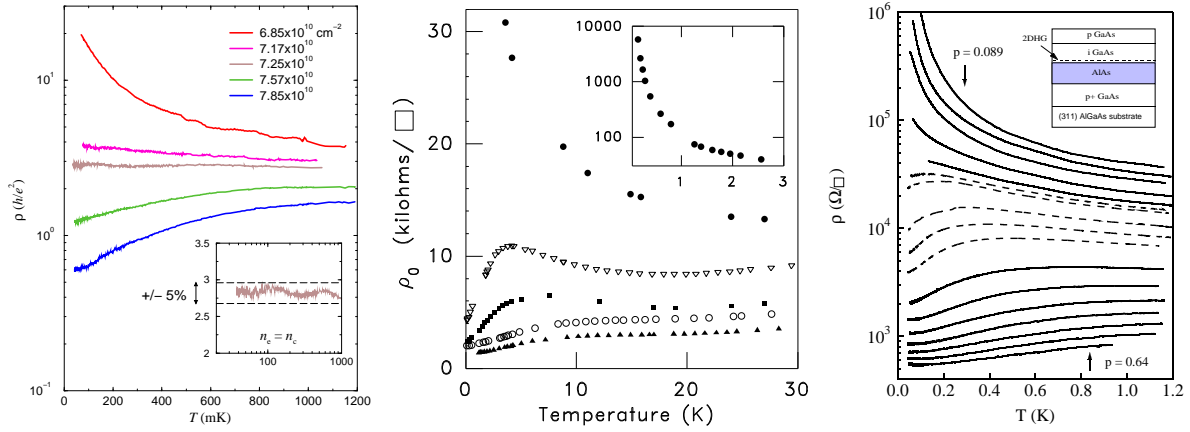


FIG. 2.3: résistivité en fonction de  $T$  à différentes densités, de gauche à droite dans un Si-MOSFET (Kravchenko *et al* [76]) puis dans un puits quantique p-SiGe (Coleridge *et al* [39]) et enfin dans une hétérostructure p-GaAs (Hanein *et al* [62]).

- La diversité des échantillons, dans lesquels on constate ce changement de comportement, laisse penser que ce phénomène est robuste et général aux systèmes bidimensionnels.
- La figure (insert de la figure de gauche de (2.3)) montre que la densité critique  $n_c$  reste très stable ( $\pm 5\%$ ) sur deux à trois décades en température. De plus il n'y a aucune remontée visible des courbes de résistivité jusqu'à des températures de l'ordre de 5 mK [97].
- Lors de transitions de phase du deuxième ordre, on s'attend à observer des dépendances algébriques sur les lois d'échelle au voisinage de la transition. Or, comme on le voit sur la figure (2.4), Kravchenko *et al* [76] ont mis expérimentalement en évidence des lois d'échelles pour la résistivité. Ces lois existent de part et d'autre de la transition et sur une large gamme de températures comprises entre 250 mK et 2K.

Pour  $n_e > n_c$ , on a une première loi d'échelles donnant une branche métallique ( $M$ ). Pour  $n_e < n_c$  on a de même une branche isolante ( $I$ ). Très remarquablement le paramètre d'échelles  $T_0(n_e)$ , qui se comporte bien en loi de puissance au voisinage de  $n_c$ , est identique pour les deux branches ( $M$ ) et ( $I$ ).  $T_0(n_e)$  est aussi indépendant du signe de  $\delta n = (n_e - n_c)$  (voir l'insert de la figure(2.4)). Pour chaque branche, il existe donc une loi :

$$\rho(T, n_e) = \rho_c f^{(M),(I)} \left[ \frac{T}{T_0(n_e)} \right] \quad (2.2)$$

$$T_0(n_e) \propto |\delta n|^b \quad \text{avec } b = 1.6 \pm 0.1$$

où  $\rho_c$  est la valeur de la résistivité à la densité critique. L'idée d'une vraie transition métal-isolant à la densité  $n_c$  est renforcée par le fait que les fonctions d'échelles sont symétriques [136] par une réflexion d'axe ( $n_e = n_c$ ) :

$$f^{(M)} \left[ \frac{T}{T_0(n_c + \delta n)} \right] = \left( f^{(I)} \left[ \frac{T}{T_0(n_c - \delta n)} \right] \right)^{-1} \quad (2.3)$$

D'autres lois d'échelles ont également été constatées notamment en champ électrique  $E$ . Elles sont de la forme  $\rho(E, n_e) = \rho_c f[\delta n / E^{1/a}]$  (voir figure(2.4)) et sont souvent de bien

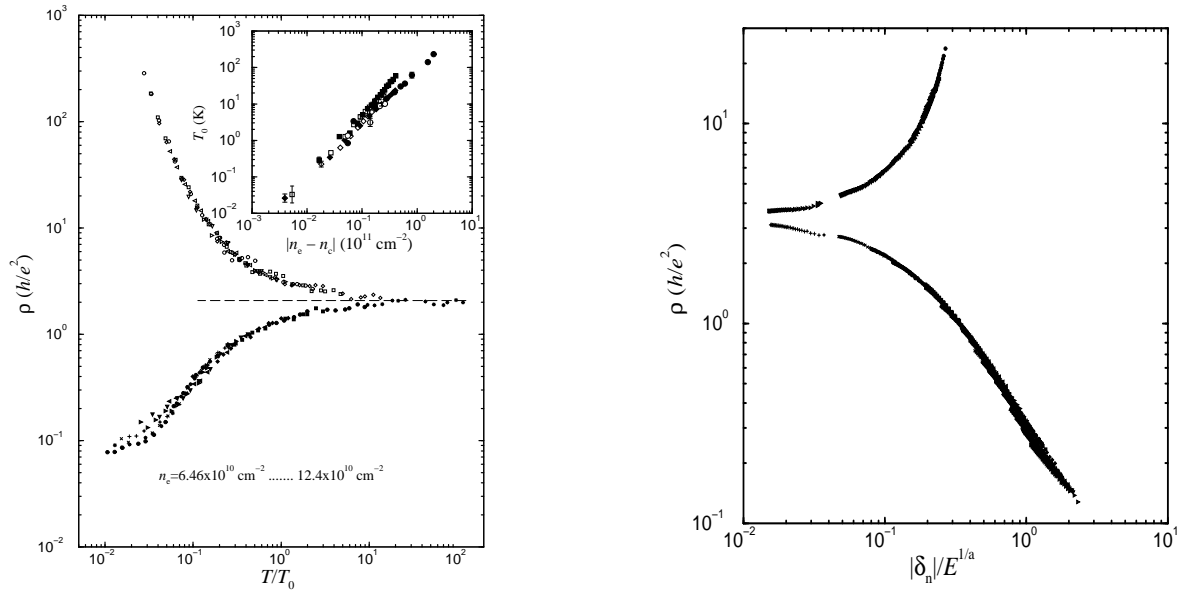


FIG. 2.4: Figures tirées de [45], à gauche : Loi d'échelles pour la résistivité en fonction de  $T/T_0$ .  $T_0$  est choisi de manière à faire apparaître la loi d'échelle et possède une dépendance en loi de puissance en  $\delta n = n_e - n_c$ . Cette loi de puissance est indépendante du régime métallique ou isolant (voir l'insert). L'axe de réflexion  $n_e = n_c$  est tracé en tirets. A droite : Loi d'échelles en champ électrique.

meilleure qualité que les lois en température dans les Si-MOSFET [66, 77]. Les exposants naturels associés à une transition de phase quantique du second ordre (voir Sondhi *et al* [138]), sont l'exposant dynamique  $z$  et l'exposant  $\nu_1$  de la divergence de la longueur de corrélation<sup>1</sup> à l'approche de la transition. Les exposants  $a$  et  $b$  sont reliés à  $z$  et  $\nu_1$  par :  $b = z\nu_1$  et  $a = (z + 1)\nu_1$ . Dans les différents systèmes, on trouve que  $\nu_1$  est compris entre 1.5 et 1.9 et que  $z$  est de l'ordre de 1 ce qui est comparable à d'autres types de transitions quantiques.

- Il a récemment été vu par Fletcher *et al* [53] que la puissance thermique de diffusion montre une divergence à la densité critique, et que cette divergence est similaire à celle calculée par Castellani *et al* pour une transition Métal-Isolant à 3D [32]. Toutes ces constatations ont appuyé l'idée qu'il s'agissait d'une vraie transition métal-isolant, ce qui a poussé :

- les expérimentateurs à produire d'autres types de mesures que l'on présente dans la section suivante, et
- les théoriciens à proposer des explications possibles à ce comportement atypique, que l'on présentera dans la section (2.4).

---

<sup>1</sup> Quand la densité tend vers la densité critique, on a une divergence de la longueur de corrélation  $\xi$  suivant :  $\xi \sim |\delta n|^{-\nu_1}$

### 2.2.2 Les autres mesures - nature de la phase isolante

#### Evaluation du facteur $r_s$ :

La caractéristique principale des nouveaux échantillons, sur lesquels a été observée la (TMI), est que leurs mobilités<sup>2</sup> sont nettement supérieures à celles atteintes précédemment pour des densités similaires. Il a dès lors été possible de conserver un signal en courant tout en diminuant la densité électronique  $n_e$  beaucoup plus que dans les anciens échantillons. Le facteur  $r_s$ , qui est le rapport de l'énergie Coulombienne sur l'énergie cinétique, est proportionnel à  $(n_e)^{-1/2}$ . On atteint dans ces nouveaux échantillons des valeurs de  $r_s$  plus élevées qu'auparavant. Dans les expériences citées précédemment dans la section (2.2.1), le facteur  $r_s$  s'échelonne entre 4 et 40. Par exemple dans les Si-MOSFET pour une densité  $n_e$ , de l'ordre de  $\sim 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et supérieure à la densité critique  $n_c$ , le facteur  $r_s$  est de l'ordre de 10. On est donc dans un régime fortement corrélé, où les théories qui considèrent les interactions en perturbation sont discutables.

#### Dépendance en désordre du paramètre critique :

On présente dans la figure (2.5), tirée de l'article de Yoon *et al* [159], des estimations du paramètre  $r_s^c$  (à la transition (TMI)) en fonction du désordre de différents échantillons ( $l = v_f \tau$ ). Yoon *et al* ont reconstitué cette figure à l'aide de données provenant de différentes expériences sur différents matériaux.

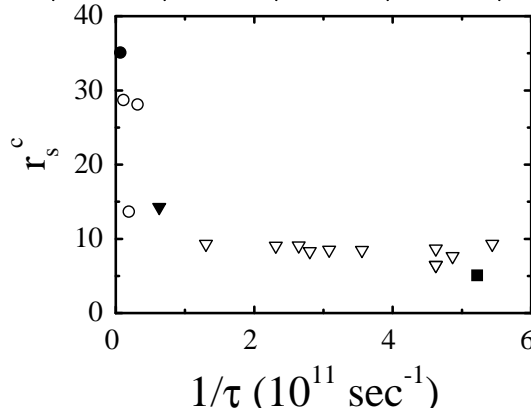


FIG. 2.5: Figure tirée de [159] : Facteur critique  $r_s^c$ , pour lequel la (TMI) est observée, en fonction de l'inverse du temps de collision élastique  $\tau$ . Chaque symbole correspond à un matériau différent : n-GaAs, p-AlAs, n-SiGe, Si-MOSFET

Ces valeurs de  $r_s^c$  concordent avec les valeurs critiques  $r_s^w$  attendues [34, 37, 143] pour la cristallisation de Wigner. En effet on a bien, en l'absence de désordre ( $\tau^{-1} \sim 0$ ),  $r_s^c \sim 37$  et en présence de désordre  $r_s^c \sim 9$  (voir section (1.2)). Cette phase isolante pourrait donc être un cristal de Wigner ou un verre de Coulomb. On présente dans les points qui suivent quelques arguments soutenant cette affirmation.

<sup>2</sup>La mobilité est à un coefficient près la constante de diffusion  $D$ .

• **Courbes I-V :**

Des mesures de la caractéristique courant-tension (I-V), pour des valeurs de densités inférieures à la transition, montrent de fortes non-linéarités avec une brusque augmentation du courant au dessus d'une tension seuil [111,159]. Ce comportement peut s'expliquer par un cristal de Wigner qui, piégé par le potentiel de désordre, se décrocherait sous l'effet de la force électrique à partir d'une certaine tension seuil.

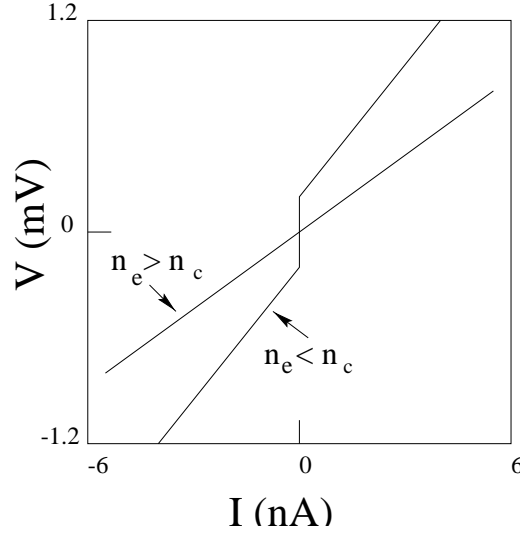


FIG. 2.6: Schéma de la caractéristique courant-tension montrant la non-linéarité du coté isolant ( $n_e < n_c$ ) et qui est supprimé au dessus de la transition (TMI). Ce schéma s'inspire d'une courbe de Shaskin *et al* [129].

• **Compressibilité :**

La plupart des résultats sur la (TMI) proviennent de mesures de transport, mais récemment Dultz *et al* et Ilani *et al* [48,67,68] ont mesuré une quantité thermodynamique : la compressibilité. Leurs résultats sur des échantillons de p-GaAs/AlGaAs montrent qu'il y a un changement thermodynamique à la transition : la compressibilité tend vers zéro. De plus les mesures locales d'Ilani *et al* montrent que la phase métallique est homogène spatialement alors que la phase isolante est inhomogène. Ces deux constats confortent l'idée du cristal de Wigner (ou verre de Coulomb) comme phase isolante, puisque ce dernier est incompressible et inhomogène.

## 2.3 Effet d'un champ magnétique sur la TMI - magnétisme du gaz

On s'intéresse dans cette section aux résultats des expériences faites sous champ magnétique dans le régime de la TMI. L'application d'un champ magnétique  $\vec{B} = \vec{B}_{\parallel} + \vec{B}_{\perp}$  sur un gaz 2D, entraîne deux types de couplage. Le premier est le couplage Zeeman du champ avec les spins  $\vec{S}_i$  des porteurs suivant le hamiltonien  $H_Z = -g\mu_B \sum_i \vec{B} \vec{S}_i$  (où  $g$  est le facteur de Landé

et  $\mu_B$  le magnéton de Bohr [96]). Le deuxième est le couplage du champ  $\vec{B}_\perp$  (perpendiculaire au gaz 2D) au mouvement des porteurs dans le plan. Ce couplage entraîne l'apparition de l'effet Hall Quantique (EHQ) entier et fractionnaire dans l'échantillon.

### 2.3.1 Effet sur la TMI d'un champ magnétique

#### Magnétorésistance :

Pour séparer les deux effets, des expériences ont été faites en présence d'un champ parallèle au gaz  $\vec{B}_\parallel$ , qui se couple uniquement avec les spins des porteurs. On montre dans la figure (2.7) l'effet d'un champ parallèle sur la résistivité. On constate une magnétorésistance positive dans les Si-MOSFET [47,110,137] et dans les hétérostructures p-GaAs [101,135,160]. Dans les MOSFET, la résistivité sature pour des champs magnétiques  $B^*$  correspondant à l'aimantation totale du gaz 2D [100,147]. Cet effet est moins marqué dans le p-GaAs où la résistivité continue à augmenter lentement après polarisation du gaz. Un champ parallèle dans SiGe [38,124] ne

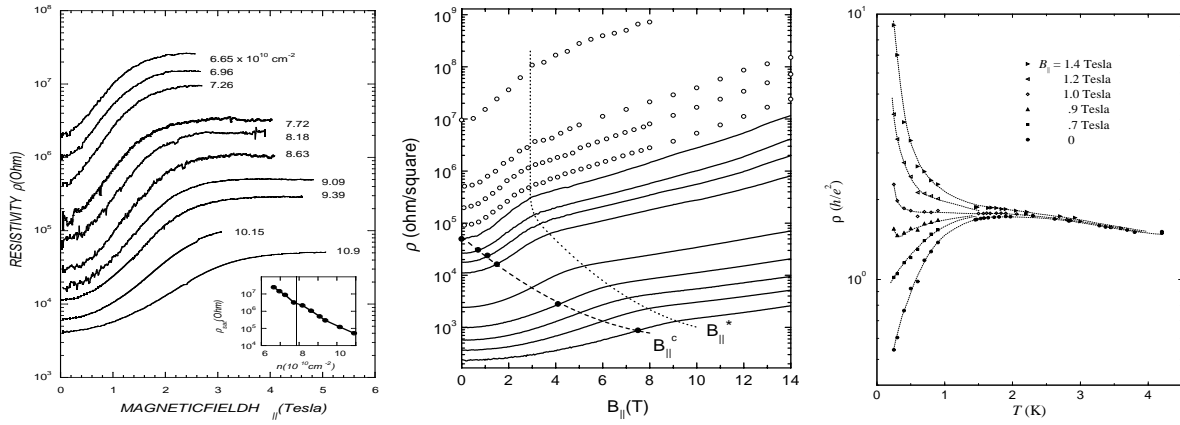


FIG. 2.7: Figure de gauche : Magnétorésistance positive à la TMI sous champ magnétique parallèle dans un Si-MOSFET [95]. Au centre : Même chose pour une hétérostructure GaAs [159]. A droite : Inversion de la pente de  $\rho(T)$  pour un Si-MOSFET correspondant à la disparition du comportement métallique [137]

donne aucun effet, les spins étant spontanément polarisés par une interaction spin-orbite. L'interaction spin-orbite étant négligeable dans les Si-MOSFET et GaAs, cela conforte l'idée que la magnétorésistance positive observée est un effet dû aux spins. On peut aussi remarquer que le champ de saturation  $B^*$  croît avec la densité :  $B^* \propto n_e$  [126].

#### Disparition du métal ou déplacement de la densité critique :

La deuxième réponse caractéristique d'un champ magnétique parallèle est qu'il provoque un retour au régime localisé dans les Si-MOSFET. On peut constater une inversion de la pente de  $\rho(T)$  aux densités explorées [137] (voir figure (2.7) à droite) et donc une disparition de la phase métallique. Toutefois des mesures de courbes  $I - V$  montrent que la transition est déplacée et

ne disparaît pas [129]. Dans les hétérostructures GaAs, on constate aussi un déplacement de la transition à des densités plus hautes (et donc des  $r_s$  plus bas). Yoon et al [160] mettent en évidence l'existence d'un champ critique (voir figure de gauche (2.8)), pour lequel la résistivité est indépendante de la température, ce qui définit la nouvelle densité critique qui croît avec le champ (voir figure de droite (2.8)).

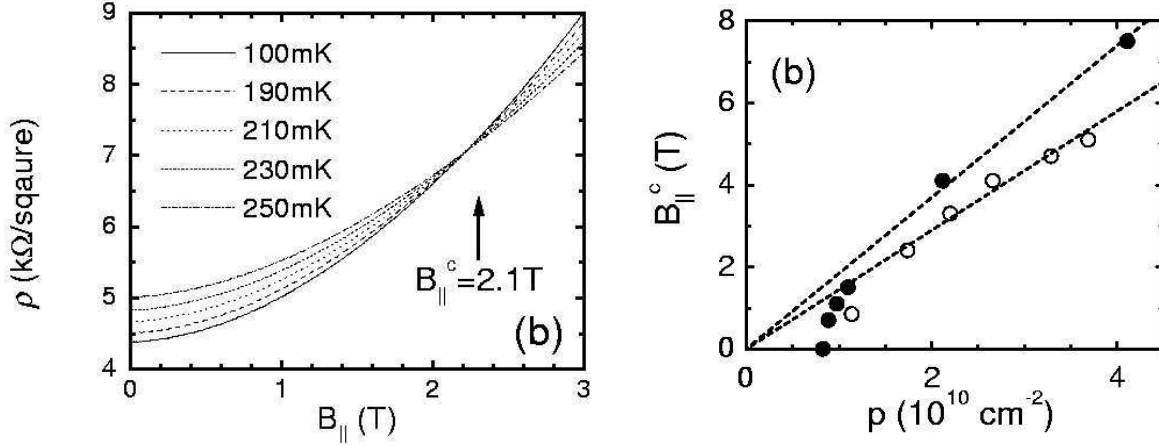


FIG. 2.8: figures tirées de [160]. A Gauche : résistivité en fonction du champ parallèle. Le croisement des courbes, où la résistivité est indépendante de la température, définit le champ critique  $B_{||}^c$ . A droite : Déplacement de la densité critique sous champ magnétique parallèle.

### Effet d'un champ perpendiculaire :

Sous l'effet d'un petit champ magnétique perpendiculaire, le gaz présente une faible magnétorésistance négative [27, 38, 123, 134] qui est identique à celle obtenue lors de la suppression des corrections de localisation faible à la conductance. Toutefois les dépendances logarithmiques en température de la résistance n'étant pas observées, un doute subsiste quant à la nature de ces "corrections de localisation faible". Si l'on augmente encore le champ, on a apparition de l'effet Hall quantique (EHQ). Hanein *et al* [63] ont montré que la transition isolant-EHQ tendait continûment vers la TMI lorsque le champ magnétique tend vers zéro. Ces deux transitions pourraient donc être de même nature.

### 2.3.2 Magnétisme

Les expériences en champ magnétique parallèle présentées dans les paragraphes précédents ont montré l'importance des spins des porteurs dans le mécanisme de la TMI. De nombreuses études de la susceptibilité de spin du gaz 2D, reposant sur l'analyse des oscillations Shubnikov-de Haas en champ magnétique incliné, ont été effectuées [51, 100, 112, 147]. Ces expériences montrent que, dans la phase métallique, le facteur de Landé  $g$  augmente lorsque l'on baisse la densité. Des études plus récentes, montrant une augmentation encore plus prononcée de  $g$  à l'approche de la densité critique de la TMI [128, 148], proposent donc que la TMI est une

transition de phase quantique avec instabilité ferromagnétique. Reznikov *et al* [115] ont mesuré directement l'aimantation due au spin, à l'aide d'un champ magnétique modulé. La figure (2.9) présente leurs résultats : On observe autour de la densité critique une augmentation suivie d'une diminution de l'aimantation.

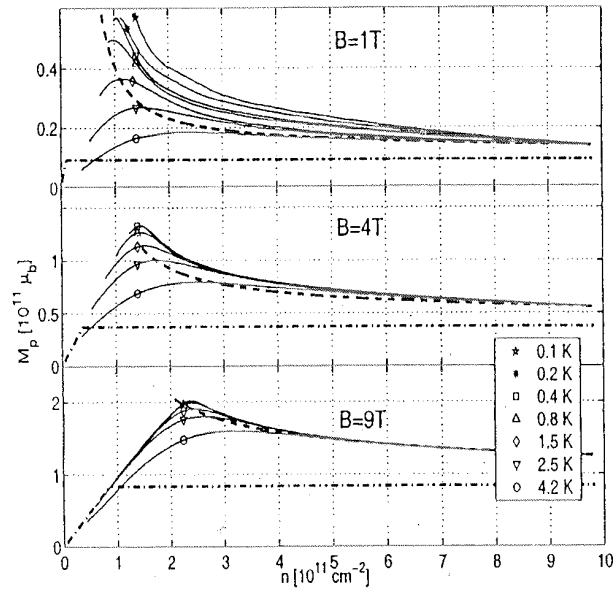


FIG. 2.9: Variation de l'aimantation d'un gaz 2D en fonction de la densité pour différents champs  $\vec{B}_{\parallel}$  et différentes températures.

## 2.4 Les propositions théoriques - Question sur un diagramme de phase possible

Il n'y a pas pour le moment de théorie expliquant le comportement atypique de la résistivité en température et en champ magnétique, faisant l'unanimité. L'importance évidente des interactions laisse penser que ces dernières pourraient expliquer ces faits expérimentaux. Déjà dans les années 80 Finkelshtein [52] a montré, par une méthode du groupe de renormalisation perturbatif, que pour un désordre faible le couplage d'interaction diverge avant que la température  $T = 0$  ne soit atteinte. Toutefois, avant que le couplage ne soit trop grand et donc la méthode perturbative non-valable, la pente de la résistivité montre un changement de signe. Ce changement a été interprété par Finkelshtein comme la possibilité qu'une phase métallique existe à faible température. Plus récemment, Castellani [33] a argumenté que le calcul pouvait être poursuivi à des températures inférieures, si l'on prenait en compte la renormalisation de l'échelle d'énergie. Toutefois, les dépendances en température, résultant du calcul, ne semblent pas correspondre aux dépendances expérimentales observées.

Dans un tout autre esprit, Dobrosavljević *et al* [46] ont proposé d'adapter la loi d'échelle  $\beta(g)$  (voir (1.3.3)) pour tenir compte des interactions entre électrons. Ils rajoutent donc de manière



phénoménologique, un terme positif à  $\beta(g)$  correspondant aux interactions et obtiennent ainsi une transition métal-isolant.

On peut aussi noter qu'un état supraconducteur a été proposé dans de nombreuses théories [12, 70, 104, 142] pour expliquer ces faits expérimentaux.

Quelques théories ne prenant pas en compte la force des interactions, ont aussi été envisagées :

- Altshuler et Maslov [3, 41] proposent un mécanisme basé sur le piégeage des porteurs par les impuretés. Ce piégeage donne lieu à un écrantage des impuretés et donc à un désordre dépendant de la température. Toutefois, le taux d'impuretés nécessaire dans cette théorie est supérieur de deux ordres de grandeur aux taux réels des échantillons expérimentaux.
- Meir [93] propose pour la transition un modèle de percolation et prédit un comportement qualitativement correct de la résistivité avec la température à l'approche de la transition, sans toutefois donner le bon ordre de grandeur de la variation en résistivité.

### Quelques limites connues et diagramme de phases potentiel :

De nombreuses questions restent donc en suspens sur les comportements magnétique et de transport d'un gaz bidimensionnel fortement corrélé en présence de désordre. On résume dans le schéma suivant (2.10) les quelques comportements connus en magnétisme et en transport qui ont été développés dans les chapitres précédents. On souligne en particulier par des points d'interrogation les questions non-élucidées.

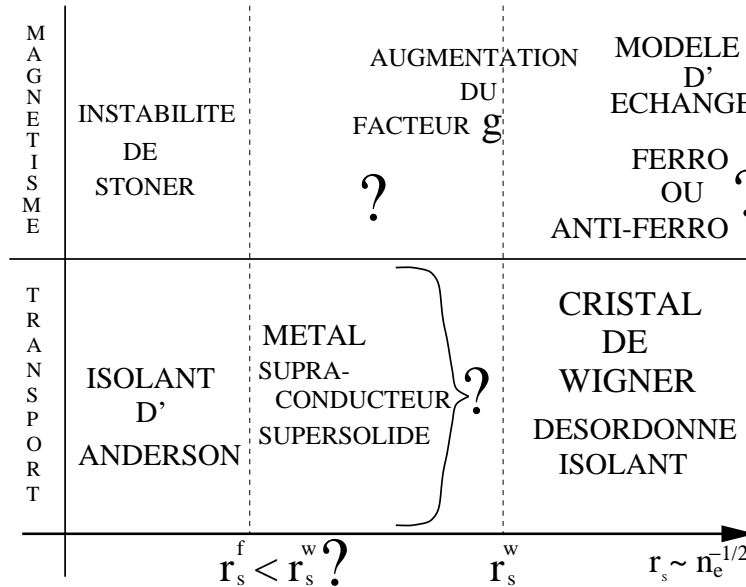


FIG. 2.10: Quelques zones d'ombre dans le diagramme de phase d'un gaz bidimensionnel à température nulle.

Il n'existe pas de méthode analytique permettant de traiter de manière générale des électrons fortement corrélés en dimension deux. On va par conséquent étudier la région de forte interaction de manière numérique. D'autres études sur des petits systèmes [43, 105, 131] ont

montré qu'il y avait une délocalisation des électrons. Benenti *et al* [14] ont notamment proposé que cette délocalisation corresponde à une nouvelle phase métallique entre l'isolant d'Anderson et le cristal de Wigner désordonné.

On étudiera en particulier si, en incluant les spins des porteurs dans le chapitre (5), on obtient un comportement magnétique correspondant aux expériences sous champ dans la zone de délocalisation. On étudiera aussi la structure de l'état intermédiaire dans le chapitre (6) pour observer si l'on trouve la trace d'un comportement solide-liquide proposé par Andreev et Lifshitz.

Dans le chapitre suivant, on décrit le modèle sur réseau et les techniques numériques utilisées pour nos études.

# Chapitre 3

## Une approche sur réseau

---

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que les théories existantes ne pouvaient expliquer avec satisfaction toutes les observations expérimentales, puisqu'elles interdisent toute transition Isolant-Métal pour des dimensions inférieures ou égales à deux. La prise en compte d'une interaction locale, traitée perturbativement, ne résout pas les divergences entre les théories et les expériences et aggrave encore plus les dissensions, puisqu'elle entraîne une plus grande localisation [2]. On développe dans cette thèse l'idée qu'il est nécessaire de prendre une interaction à longue portée entre électrons pour expliquer les faits expérimentaux. Nous allons donc étudier l'interaction à longue portée dans un domaine de paramètres où l'énergie d'interaction est du même ordre de grandeur que les autres énergies considérées. Dans ce domaine  $1 \leq r_s \leq 10^2$ , aucune énergie ne peut être considérée comme perturbative ou non-pertinente. Les techniques perturbatives développées dans les limites de faibles ( $r_s \gg 1$ ) ou fortes ( $r_s \ll 1$ ) densités ne sont alors plus valables. On a recours aux techniques numériques pour étudier ce domaine de paramètres. On étudiera un modèle sur réseau, où les différents champs prennent des valeurs uniquement en des points discrets de l'espace qu'on appellera sites. Ces sites formeront un réseau dont le pas sera noté  $a$ .

### 3.1 Le modèle sur réseau

A partir de ce chapitre et pour le reste du manuscrit, on étudie des systèmes discrets. Nous allons donc expliciter, dans ce chapitre, les formes choisies pour les différentes énergies et aussi quelques notations. Parmi les modèles discrets existants pour décrire des fermions en interaction, le modèle d'Hubbard [114] est le plus couramment étudié et est celui sur lequel il existe le plus de résultats dans la littérature scientifique<sup>1</sup>. Pour décrire l'effet du désordre, Anderson [5] utilise un modèle discret avec des énergies potentielles aléatoires sur les sites. Voulant étudier l'effet combiné du désordre et des interactions, on prendra pour modèle discret celui d'Anderson auquel on rajoutera une interaction entre particules. On considère pour

---

<sup>1</sup>Toutefois son diagramme de phase et loin d'être connu pour toutes les valeurs des paramètres.

l'énergie d'interaction, soit une interaction du type d'Hubbard, qui est locale sur les sites, soit une interaction à longue portée qui comprend l'interaction d'Hubbard à laquelle on rajoute une interaction qui décroît en  $(1/r)$ . Cette deuxième interaction sera appelée Coulombienne. Le rapport entre l'énergie d'interaction de deux particules sur des sites adjacents et l'énergie d'interaction de deux particules sur le même site est égal à  $1/2$ . On ne variera pas ce paramètre au cours de la thèse.

$$\begin{aligned}
 H_K &= -t \sum_{\langle i, i' \rangle} \sum_{\sigma} c_{i, \sigma}^{\dagger} c_{i', \sigma} + h.c. \\
 H_V &= W \sum_{i, \sigma} v_i \hat{n}_{i, \sigma} \\
 H_U &= \frac{U}{2} \sum_{\substack{i, i' \\ i \neq i'}} \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{\hat{n}_{i, \sigma} \hat{n}_{i', \sigma'}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{i'}|} + 2U \sum_i \frac{\hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}}{a} \quad \text{Coulomb} \\
 &= 2U \sum_i \frac{\hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}}{a} \quad \text{Hubbard}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Le terme d'énergie cinétique  $H_K$  couple les sites plus proches voisins  $\langle i, i' \rangle$  avec l'élément de couplage  $(-t)$ . La force du potentiel de désordre est déterminée par le paramètre  $W$ , avec un tirage aléatoire du potentiel  $v_i$  sur chaque site. On prendra une distribution uniforme dans l'intervalle  $[-1/2; 1/2]$  pour les variables aléatoires  $v_i$  (voir figure(3.1)). On s'intéressera en

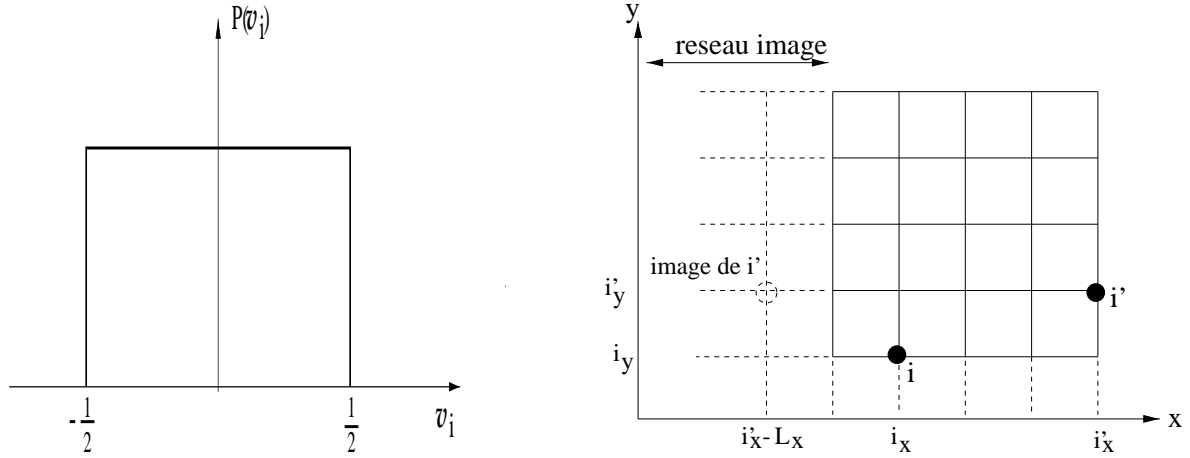


FIG. 3.1: A gauche : distribution du potentiel aléatoire  $v_i$ . A droite : réseau carré avec conditions de bords périodiques.

particulier à deux limites. La première est celle où l'interaction est nulle et où le hamiltonien est dominé par le terme à un corps  $H_0$ . La deuxième est celle où l'énergie cinétique est négligeable et où le hamiltonien est dominé par le hamiltonien des interactions et du désordre  $H_\infty$ .

$$\begin{aligned}
 H_0 &= H_K + H_V \\
 H_\infty &= H_V + H_U
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

### 3.1.1 Taille finie et conditions de bords

En pratique, on étudiera des systèmes de  $N$  fermions dans un réseau cubique de sites de pas  $a$ , pour un système de basse dimension  $d(= 1, 2)$ . On appelle  $(\vec{x}, \vec{y})$  les directions principales du réseau et  $(L_x, L_y)$  le nombre de sites dans ces directions respectives. On repère un site  $i$  par ses coordonnées<sup>2</sup>  $i = (i_x, i_y)$  avec  $1 \leq i_p \leq L_p$  et  $p = x, y$ . Le nombre total de sites est alors  $V = L_x \times L_y$ . On fait le choix de prendre des conditions périodiques aux bords de l'échantillon. On aura donc un anneau en dimension un et un tore en dimension deux. On impose ces conditions en rajoutant les couplages suivants aux bords de l'échantillon, qui témoignent du fait que les sites aux bords sont proches voisins :

$$c_{(L_x+1,y);\sigma} = c_{(1,y);\sigma} \text{ et } c_{(x,L_y+1);\sigma} = c_{(x,1);\sigma} \quad (3.3)$$

Les conditions aux bords posent aussi un problème au niveau de la définition de l'interaction à longue portée. En effet si la portée est réellement infinie, une particule interagit non seulement avec une particule dans le réseau, mais aussi avec toutes ses images par périodicité. On prend ici le parti d'annuler de manière brutale l'interaction au delà d'une distance  $L_x/2$  à une dimension et  $\sqrt{\left(\frac{L_x}{2}\right)^2 + \left(\frac{L_y}{2}\right)^2}$  en dimension deux. On définit alors la distance entre deux sites  $i$  et  $i'$  comme la distance minimale entre le site  $i$  et toutes les images de  $i'$  (voir figure (3.1)).

$$|\vec{r}_i - \vec{r}_{i'}|^2 = a^2 \left[ \text{Min} \left( (i_x - i'_x)^2; (i_x - (L + i'_x))^2; (i_x - (i'_x - L))^2 \right) + \text{Min} \left( (i_y - i'_y)^2; (i_y - (L + i'_y))^2; (i_y - (i'_y - L))^2 \right) \right]$$

## 3.2 Liens avec les paramètres du modèle continu

La comparaison des différentes énergies est essentielle à la compréhension du système. Pour cela on utilise des paramètres adimensionnés mesurant les forces relatives des différentes énergies entres elles. Ces paramètres, introduits dans le cadre de modèles continus, sont aussi utilisés et mesurés en physique expérimentale pour caractériser les échantillons étudiés. Nous calculons donc ici ces paramètres, dans le modèle discret bidimensionnel étudié dans la suite. Nous serons alors mieux à même de comparer les résultats numériques aux valeurs expérimentales. Ces paramètres sont le facteur  $r_s$ , déjà introduit dans le paragraphe (1.1.1), et le paramètre  $k_f l$  qui est une mesure de la force du désordre.

### 3.2.1 Correspondances entre modèle continu et discret

Considérons le hamiltonien du modèle continu correspondant au modèle discret que l'on a choisi d'étudier au paragraphe précédent (3.1) :

$$H_K + H_V + H_U = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{\nabla}_i^2 + V_{al}(\vec{r}_i) \right) + \frac{e^2}{\epsilon} \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (3.4)$$

---

<sup>2</sup>Si on est en dimension une, on prendra comme convention  $L_y = i_y = 1$  et  $i = i_x$ .

où  $m^*$  est la masse effective des fermions due au potentiel périodique des atomes du solide,  $V_{al}$  est le potentiel de désordre,  $e$  est la charge des particules et  $\epsilon$  la constante diélectrique du solide étudié. On identifie alors immédiatement :

$$t \equiv \frac{\hbar^2}{2m^*a^2} ; Wv_i \equiv V_{al}(\vec{r}_i) ; U \equiv \frac{e^2}{\epsilon a} \quad (3.5)$$

Expérimentalement les gaz de particules sont aussi caractérisés par la densité de particules  $n_e$ , qui est une mesure de la distance moyenne entre les particules. De plus en l'absence de désordre, les propriétés du système ne dépendent que de la densité d'état au niveau de Fermi  $N_s(\epsilon_f)$ . Nous allons voir comment exprimer ces quantités en fonction des paramètres du modèle discret.

- La densité est reliée au remplissage  $\nu = N/V$ , qui est le nombre de particules par site. Chaque site représentant un volume  $a^2$ , on a  $n_e \equiv \frac{\nu}{a^2}$ .

- En l'absence de désordre, les états sans interaction sont quantifiés par  $k_i = n_i \frac{2\pi}{aL_i}$  avec  $i = x, y$ . On a donc, compte tenu de la dégénérescence de spin, deux états dans un volume  $\frac{2\pi}{aL_x} \cdot \frac{2\pi}{aL_y} = \frac{(2\pi)^2}{a^2V}$ . La densité d'état dans l'espace des impulsions est alors  $N_s(\vec{k}) = 2V \frac{a^2}{(2\pi)^2}$ . On en déduit alors<sup>3</sup> que :

$$N_s(\epsilon) = \frac{2m^*a^2}{\hbar^2} \frac{2V}{4\pi} \equiv \frac{V}{2\pi t} \quad \text{et} \quad N = \int_0^{\epsilon_f} N_s(\epsilon) d\epsilon$$

On peut donc aussi en déduire l'énergie de Fermi :  $\epsilon_f \equiv 2\pi t\nu$ .

### 3.2.2 La force des interactions $r_s$

On a défini dans la section (1.1.1) le paramètre  $r_s$  qui est proportionnel au rapport de l'énergie d'interaction sur l'énergie cinétique. Il s'exprime simplement en fonction des paramètres du modèle discret :

$$r_s = \frac{m^*e^2}{\hbar^2\epsilon} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi n_e}} \equiv \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \frac{U}{t\sqrt{\nu}} \quad (3.6)$$

Il est à noter que dans les simulations numériques, nous changeons le paramètre  $r_s$  en variant le rapport  $U/t$  à  $N$  et  $V$  constants. Dans les expériences, le paramètre  $r_s$  est varié par un changement de densité, qui correspondrait plus à un changement de remplissage  $\nu = N/V$  dans le modèle discret. Le changement du nombre de particules pourrait donner des résultats plus dépendant des effets de tailles. On sait, par exemple, que à  $V$  fixé certaines valeurs de  $N$  diminuent l'énergie totale par particule. Ce sont les nombres dits magiques [74]. On peut noter que la définition de  $r_s$  ne prend pas en compte le désordre. Une définition plus rigoureuse de la force des corrélations, serait de comparer l'énergie à deux particules, provenant du terme  $H_U$ , à celle à une particule provenant des termes  $H_K + H_V$ . On remarque d'ailleurs, dans les chapitres (2) et (6), que les paramètres critiques de transition ont une dépendance en désordre.

---

<sup>3</sup>En effet on a  $\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{k}^2$  et par définition la densité d'états en énergie est  $N_s(\epsilon)d\epsilon = N_s(\vec{k})d\vec{k}$ . On obtient donc  $N_s(\epsilon) \frac{\hbar^2}{2m^*} 2kd\vec{k} = 2V \frac{a^2}{(2\pi)^2} 2\pi k d\vec{k}$

### 3.2.3 Une mesure du désordre $k_f l$

Le facteur  $k_f l$  est une mesure de la force du désordre (voir section (1.3.2)). Le libre parcours moyen  $l$  est relié au temps typique entre deux collisions sur des impuretés  $\tau$  par<sup>4</sup>  $l = v_f \tau$ . On peut exprimer alors ce paramètre de plusieurs manières :

$$k_f l = 2\pi \frac{l}{\lambda_f} = \frac{\hbar}{m^*} k_f^2 \tau = 2\epsilon_f \frac{\tau}{\hbar} = 2 \frac{\epsilon_f}{\Gamma} \quad (3.7)$$

où  $\Gamma$  est l'élargissement spectral des états propres sans désordre, lorsque l'on branche le désordre, aussi appelé "self-énergie". Pour un désordre faible, on calcule  $\Gamma$  par la règle d'or de Fermi :

$$\Gamma = 2\pi \sum_{\vec{k}} \frac{|\langle \vec{k}_f | H_V | \vec{k} \rangle|^2}{\epsilon_f - \epsilon(\vec{k})} \approx 2\pi N_s(\epsilon) \frac{W^2}{12V} \quad (3.8)$$

où la barre dénote une moyenne sur les réalisations du désordre<sup>5</sup>.  $N_s(\epsilon)$  et  $\epsilon_f$  ayant été exprimés à l'aide des paramètres du modèle discret dans le paragraphe (3.2.1), on déduit de l'équation(3.7) l'expression de  $k_f l$  :

$$k_f l = 48\pi\nu \left( \frac{t}{W} \right)^2 \quad (3.9)$$

Il est à noter que ce calcul est fait en l'absence d'interactions.

Expérimentalement, la (TMI) est observée pour des valeurs de  $r_s$  comprises entre 4 et 40 et à un désordre  $k_f l$  compris entre 1 et 5. On réglera donc les paramètres du modèle discret de manière à avoir des valeurs comparables.

## 3.3 Grandeurs reliées à la localisation

Les expériences sur les gaz bidimensionnels, développées dans le chapitre précédent, mesurent essentiellement des propriétés de transport comme la résistivité. Il n'existe pas de formule, exploitable numériquement, permettant un calcul direct de la conductance en fonction de l'interaction. On va donc s'intéresser plutôt à la délocalisation de la fonction d'onde de l'état fondamental, qui est reliée à la conductance du système à température nulle. On étudiera trois quantités reliées à l'extension spatiale de la fonction d'onde : la densité spatiale, les courants permanents et les statistiques spectrales.

### 3.3.1 La densité spatiale

Dans le réseau, on définit la densité  $\rho_i$  au site  $i$ , comme le nombre moyen de particules sur ce site dans l'état fondamental. Ainsi, si  $|\Psi_0\rangle$  est l'état fondamental du problème à N

---

<sup>4</sup>la vitesse de Fermi est  $v_f = \frac{\hbar}{m^*} k_f$

<sup>5</sup>Compte tenu de la distribution uniforme des potentiels dans une boîte de largeur  $W$ , la moyenne des couplages est  $|\langle \vec{k}_f | H_V | \vec{k} \rangle|^2 = W^2/12V$

particules, on aura :

$$\rho_i = \langle \Psi_0 | (\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}) | \Psi_0 \rangle \text{ et } \sum_{i=1}^V \rho_i = N \quad (3.10)$$

A partir de la densité on construit la fonction de corrélation densité-densité<sup>6</sup>  $C(r)$ , qui donne en plus un renseignement sur la structure de l'état fondamental dans la direction  $r = (r_x, r_y)$ .

$$C(r) = \frac{1}{N} \sum_i \rho_i \rho_{i+r} \quad (3.11)$$

A l'aide de  $C(r)$ , on construit le paramètre  $\gamma$  de cristallisation :

$$\gamma = \text{Max}_r \{C(r)\} - \text{Min}_r \{C(r)\} \quad (3.12)$$

qui vaut 1 lorsque les charges sont ordonnées spatialement suivant des directions précises. On a alors un solide.  $\gamma$  vaut 0 lorsque les charges sont distribuées uniformément spatialement (liquide). Ce critère a été utilisé par Pikus et Efros [105] pour l'étude de la cristallisation de Wigner.

### 3.3.2 Les courants permanents

On a vu, dans la section (1.4.2), qu'un flux magnétique à travers un anneau crée un courant. On montre dans ce paragraphe comment simuler un flux. Considérons par exemple un réseau de  $L_x \times L_y$  sites avec des conditions de bords durs suivant la direction  $y$  et des conditions périodiques suivant  $x$ . Ce réseau possède alors une géométrie annulaire. En faisant passer un flux à travers cet anneau, qu'on notera  $\Phi_x$ , on va donc créer un courant  $I_x$  dans la direction  $x$ . Si on considère maintenant des conditions de bords périodiques dans les directions  $x$  et  $y$ , la géométrie sera celle d'un tore. Le même flux  $\Phi_x$  créera toujours un courant principalement dans la direction  $x$ . On pourra, de plus, considérer un second flux  $\Phi_y$  passant à l'intérieur du tore et créant un courant principalement dans la direction  $y$ .

On peut, par une transformation de jauge, tenir compte de ces flux en faisant un changement de conditions de bords (voir (1.4.2)). Ces nouvelles conditions expriment le fait que les couplages aux bords dépendent maintenant des flux :

$$\begin{aligned} c_{(L_x, y); \sigma} &= e^{(i\phi_x)} c_{(1, y); \sigma} \text{ et } I_x = \frac{\partial E_0}{\partial \Phi_x} \\ c_{(x, L_y); \sigma} &= e^{(i\phi_y)} c_{(x, 1); \sigma} \text{ et } I_y = \frac{\partial E_0}{\partial \Phi_y} \end{aligned} \quad (3.13)$$

On définit au site  $i$  des courants locaux  $j_i^{x,y}$ , partant de  $i = (i_x, i_y)$  dans la direction  $x$  ou  $y$  :

$$j_i^x = \langle \Psi_0 | c_{(i_x+1, i_y)}^+ c_{(i_x, i_y)} | \Psi_0 \rangle \text{ et } j_i^y = \langle \Psi_0 | c_{(i_x, i_y+1)}^+ c_{(i_x, i_y)} | \Psi_0 \rangle \quad (3.14)$$

On étudiera la distribution spatiale de ces courants dans les chapitres (4) et (5). Les courants locaux sont reliés aux courants globaux par les relations :

$$I_x = \frac{1}{L_y} \sum_i j_i^x \text{ et } I_y = \frac{1}{L_x} \sum_i j_i^y \quad (3.15)$$

---

<sup>6</sup>voir paragraphe (1.2.1)



### 3.3.3 Matrices aléatoires et statistiques spectrales

La théorie des matrices aléatoires est utilisée pour les systèmes complexes afin d'obtenir les propriétés statistiques sur des niveaux d'énergies<sup>7</sup>. L'idée est que seules les symétries fondamentales du système imposent l'allure des distributions des niveaux d'énergies. Wigner, dans les années cinquante [157], a posé les bases de cette théorie pour expliquer la distribution des résonances et de leur largeur dans les noyaux des atomes. Elle a ensuite été développée par Dyson et d'autres [49, 50, 92]. Dyson propose notamment l'existence de trois classes de symétries pour les matrices hamiltoniennes de systèmes quantiques à N-corps, qui seront donc décrites par trois ensembles de matrices aléatoires. Le premier ensemble appelé gaussien orthogonal (GOE) correspond à des systèmes invariants par renversement du sens du temps et qui conserve le spin. Le deuxième appelé gaussien unitaire (GUE) correspond à des systèmes qui ne sont pas invariants par renversement du temps<sup>8</sup>. Le troisième appelé gaussien symplectique (GSE) correspond à des systèmes qui sont invariants par renversement du temps mais qui ne conservent pas le spin<sup>9</sup>. A partir de ces classes de symétries, on construit une mesure  $\mu(dH)$  sur les matrices hamiltoniennes  $H$  appartenant à ces ensembles. Pour définir une probabilité<sup>10</sup>, on doit ensuite faire un choix pour la densité de probabilité  $\rho(H)$ . On prend par définition dans chaque ensemble la densité :

$$\rho(H) \propto \exp(-\beta \text{Tr}(H^2)) \text{ avec } \begin{cases} \beta = 1 & \text{si } H \in (GOE) \\ \beta = 2 & \text{si } H \in (GUE) \\ \beta = 4 & \text{si } H \in (GSE) \end{cases}$$

Par un changement de variables et après intégration sur les vecteurs propres<sup>11</sup>, on réécrit la probabilité en fonction des valeurs propres  $E_i$  de  $H$ . On obtient ainsi pour leur densité de probabilité jointe :

$$\rho(E_1, \dots, E_N) \propto \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\beta \exp(-\beta \sum_i E_i^2) \quad (3.16)$$

Cette densité s'annulant pour  $E_i = E_j$ , on dit qu'on a une répulsion entre les niveaux. Cette répulsion a été constatée sur les distributions des spectres des noyaux lourds puis par la suite dans d'autres systèmes où la théorie des matrices aléatoires a ensuite été appliquée. On citera par exemple et par ordre historique : les particules métalliques [57], les billards quantiques chaotiques [20] et les systèmes quantiques mésoscopiques métalliques.

#### Outils pour l'étude des fluctuations spectrales :

Pour caractériser les fluctuations spectrales d'un système, on utilise principalement deux

---

<sup>7</sup>Si le système est fermé on étudiera les niveaux d'énergies et si le système est ouvert les modes de diffusion à travers le système.

<sup>8</sup>Par exemple, un système plongé dans un champ ou un flux magnétique est décrit par l'ensemble (GUE).

<sup>9</sup>Par exemple, un système où il y a des interactions spin-orbite est décrit par (GSE).

<sup>10</sup> $P(H) = \rho(H)\mu(dH)$

<sup>11</sup>Une transformation orthogonale (respectivement unitaire et symplectique) diagonalise  $H$  dans (GOE)(respectivement (GUE) et (GSE)), cette transformation est aussi un changement de variable qui fait passer des variables  $\{H_{ij}\}$  aux variables propres qui sont l'ensembles des vecteurs et valeurs propres de  $H$ .

quantités. La première est la densité de probabilité  $P(\frac{|E_{i+1}-E_i|}{\Delta} = s)$  d'avoir l'écart entre deux niveaux d'énergies consécutifs égal à  $s$  fois l'écart moyen  $\Delta$ .  $\Delta$  est la moyenne, sur les écarts entre niveaux consécutifs<sup>12</sup> prise, soit sur un grand nombre de niveaux d'énergies consécutifs autour de  $E_i$  (si on ne considère qu'un seul spectre), soit sur différents spectres autour de la même énergie.  $\Delta$  dépend du niveau auquel on s'intéresse. Ainsi si l'on considère des valeurs de  $s$  pour un ensemble de niveaux d'énergies consécutifs, il sera nécessaire de déplier le spectre pour obtenir une valeur de  $\Delta$  uniforme sur cet ensemble de niveaux [26]. La deuxième quantité est la variance  $\Sigma_2(E) = \langle N(E)^2 \rangle - \langle N(E) \rangle^2$ , du nombre de niveaux  $N(E)$  compris dans un intervalle en énergie de largeur  $E$ .

Dans un système décrit par la théorie des matrices aléatoires, on obtient pour  $P(s)$  et  $\Sigma_2(E)$  suivant les symétries du système [26, 98] :

$$P_W(s) = A(\beta)s^\beta \exp(-B(\beta)s^2) \text{ et } \Sigma_2^W(E) = \frac{2}{\beta\pi^2} \ln(E) + C(\beta) \quad (3.17)$$

où  $A, B$  et  $C$  sont fonction de  $\beta$  uniquement. Ces distributions sont dites de Wigner-Dyson. Si par contre, il n'y a pas de corrélation entre les niveaux d'énergies du système, la distribution des écarts de niveaux est Poissonienne :

$$P_P(s) = \exp(-s) \text{ et } \Sigma_2^P(E) = E \quad (3.18)$$

#### Lien avec la transition métal-isolant :

Les statistiques spectrales peuvent être utilisées pour déceler la transition métal-isolant, comme l'ont montré Shklovskii *et al* en étudiant le modèle d'Anderson en dimension trois [132] en milieu de bande. Dans la limite isolante, si l'on considère deux états consécutifs localisés, ils ont a priori un recouvrement spatial faible et ne dépendent donc pas des mêmes potentiels aléatoires. On s'attend donc à ce que les corrélations entre niveaux soit faibles et qu'il n'y ait pas de répulsion de niveau. La statistique doit être de type Poisson. A l'opposé dans la limite métallique, les états délocalisés sur tout le système ont un grand recouvrement entre eux et perçoivent donc tous les mêmes potentiels aléatoires. On s'attend donc à ce que les statistiques suivent bien celle de Wigner-Dyson<sup>13</sup>. L'observation du passage de la statistique de Wigner-Dyson à la statistique de Poisson [132], permet de localiser avec précision la transition métal-isolant.

Pour terminer, il est à noter qu'il existe d'autres statistiques possibles. Notamment les états en bord de mobilité (voir (1.3.3) ) exhibent une troisième statistique [25, 132] dite critique, qui est intermédiaire entre Wigner-Dyson et Poisson. Ce type de statistique se retrouve aussi dans le problème de deux particules en interaction ponctuelle, où Shepelyansky a montré que les états en milieu de bande du problème pouvaient subir une délocalisation induite par les interactions [130]. Pour la force des interactions où la délocalisation est maximale [122, 152], on trouve une statistique dite de semi-Poisson :

$$P_{SP}(s) = 4s \exp(-s) \text{ et } \Sigma_2^{SP}(E) \approx 0.41E + 0.16 \quad (3.19)$$

<sup>12</sup>cette quantité est donc proportionnelle à l'inverse de la densité d'états.

<sup>13</sup>Dans les fait la statistique est bien décrite par Wigner-Dyson sur des domaines en énergie plus petit que l'énergie de Thouless [145].

## 3.4 Méthode numérique

### Pourquoi étudier des systèmes de petites tailles ?

Etant intéressé par le régime où l'énergie d'interaction est du même ordre de grandeur que les autres énergies, les approches analytiques perturbatives traditionnelles ne peuvent plus être utilisées sans autres justifications. On utilise alors des approches numériques. Pour comprendre un système en physique de la matière condensée, il suffit de connaître l'état fondamental et les premières excitations du système. Aussi parmi les approches numériques, on distingue deux philosophies. La première consiste à obtenir exactement les premiers états propres du système. Si on considère un système de  $N$  électrons sur un réseau de  $V$  sites, la taille de l'espace de Fock est  $N_{Ft} = C_{2V}^N$ , elle augmente donc exponentiellement avec  $N$  et  $V$ . Donc si l'on veut obtenir exactement les états, les capacités numériques actuelles nous obligent à nous restreindre à des systèmes de petites tailles. La deuxième approche consiste à faire des approximations, qui permettent d'obtenir des résultats sur des systèmes plus grands, mais dont la validité n'est pas connue dans les régions intermédiaires en interaction<sup>14</sup>. On prend le parti dans cette thèse de ne faire que des calculs exacts pour essayer de comprendre la structure du fondamental, bien que l'on soit alors assujéti aux effets de tailles finis. On peut cependant justifier l'études de petits systèmes :

- Dans le cadre de l'effet Hall quantique fractionnaire, des études numérique sur des systèmes de trois et quatre particules ont aidé Laughlin à construire sa fonction d'onde [80, 81]. Des études avec huit particules permettent de retrouver la fonction d'onde avec une grande précision [59, 60].
- Des études expérimentales calculant le temps de cohérence de phase  $\tau_\phi$  pour des gaz bidimensionnels, de trous dans des hétérostructures [109] GaAs/AlGaAs et d'électrons dans des MOSFET au silicium [84], montrent que dans un domaine ayant pour taille la longueur de cohérence de phase  $l_\phi$ , se trouvent seulement quelques dizaines de particules.
- Les résultats obtenus dans des études précédentes sur des systèmes de petites tailles [14, 105] sont en accord avec les résultats en Monte-Carlo sur des systèmes plus grands [37, 143], notamment sur les seuils de cristallisation de Wigner avec et sans désordre.
- Enfin, on remarquera que les résultats de cette thèse au chapitre 5 sur les propriétés magnétiques de petits systèmes sont en accord avec les résultats expérimentaux [95, 115, 159] développés au chapitre 2.

### Méthode de Lanczos :

On cherche à obtenir les états de basses énergies du problème sur réseau. Pour cela on écrit le hamiltonien  $H$  du système dans la base des sites  $\{\prod_{i=1}^{i_N} c_{i,\sigma_i}^+ |\emptyset\rangle\}$  et on utilise ensuite l'algorithme de Lanczos pour diagonaliser cet hamiltonien. L'algorithme de Lanczos est une méthode de diagonalisation exacte des matrices hermitiennes, qui consiste, dans un premier temps, à tridiagonaliser la matrice  $H$  par une méthode itérative.

• Méthode de tridiagonalisation : Si  $N_{Ft}$  est la dimension de la matrice  $H$ , l'algorithme de Lanczos construit itérativement une base orthonormale  $(|v_i\rangle)_{i=1,\dots,N_{Ft}}$  dans laquelle  $H$  est

<sup>14</sup>On citera par exemple les calculs en approximation Hartree-Fock ou encore les calculs Monte-Carlo.

tridiagonale. Si on appelle  $V$  la matrice formée par les vecteurs colonnes  $(|v_i\rangle)$ , alors on a :

$$T = V^\dagger H V = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2^* & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_3^* & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & \cdots & 0 & b_n^* & a_n \end{bmatrix}$$

L'algorithme itératif est le suivant : on part d'un vecteur unitaire aléatoire  $|v_1\rangle$ , qui sera notre premier vecteur de la base. On pose alors  $a_1 = \langle v_1 | H | v_1 \rangle$  et  $b_1 = 0$  et on itère ensuite l'algorithme suivant pour  $i$  allant de 1 à  $N_{Ft}$  :

$$\begin{aligned} |v_{i+1}\rangle &= \frac{1}{b_{i+1}} (H|v_i\rangle - a_i|v_i\rangle - b_i|v_{i-1}\rangle) \text{ avec} \\ a_{i+1} &= \langle v_{i+1} | H | v_{i+1} \rangle \text{ et } b_{i+1} = ||H|v_i\rangle - a_i|v_i\rangle - b_i|v_{i-1}\rangle|| \end{aligned} \quad (3.20)$$

A partir de cette matrice hermitienne tridiagonale, il est ensuite assez simple d'obtenir les valeurs propres de la matrice, car on connaît le polynôme caractéristique sous cette forme. On peut alors chercher, par une technique quelconque<sup>15</sup>, les racines du polynôme qui donnent les valeurs propres  $(E_i)_{i=1,\dots,N_{Ft}}$ . On obtient les vecteurs propres  $(|\Psi_i\rangle)$  dans un deuxième temps, en utilisant le fait que si  $E_1$  est de module maximum, alors  $(E_i/E_1)^p$  tend vers zéro quand  $p$  tend vers l'infini. Aussi si on décompose  $|v_1\rangle$  dans la base des  $(|\Psi_i\rangle)$  et que l'on applique un grand nombre de fois le hamiltonien  $H$ , on obtient  $|\Psi_1\rangle$

$$E_1^{-p} H^p |v_1\rangle = \sum_{i=1}^{N_{Ft}} \left( \frac{E_i}{E_1} \right)^p \alpha_i |\Psi_i\rangle \xrightarrow{p \rightarrow \infty} \alpha_1 |\Psi_1\rangle \quad (3.21)$$

puis successivement les autres états propres.

- Méthode incomplète

Si on arrête le processus de tridiagonalisation, à un ordre  $l$  petit ( $l \ll N_{Ft}$ ). Les valeurs et vecteurs propres  $(E_i^{(l)}, |\Psi_i^{(l)}\rangle)$  de la matrice tridiagonale d'ordre  $l$ , qu'on appelle vecteurs de Ritz, sont une approximation des éléments propres du problème initial. L'intérêt de la méthode est que l'on obtient de cette manière les valeurs propres de plus grands modules, parmi lesquels se trouvent l'état fondamental et les premières excitations. On vérifie ensuite la précision  $\epsilon$  des éléments propres en imposant la condition, sur la convergence des vecteurs propres,  $||H|\Psi_i^{(l)}\rangle - E_i^{(l)}|\Psi_i^{(l)}\rangle|| < \epsilon$ .

- remarques

Cette méthode est particulièrement efficace pour les matrices contenant peu d'éléments non-nuls puisque cela diminue le nombre d'erreurs numériques lors du calcul des  $(E_i^{(l)}, |\Psi_i^{(l)}\rangle)$ . Aussi la matrice hamiltonienne utilisée dans nos problèmes est particulièrement bien adaptée à l'utilisation de cette méthode, puisque les couplages dus à l'interaction et aux potentiels de désordre sont diagonaux, et les seuls éléments non-diagonaux sont les couplages cinétiques qui

<sup>15</sup>On pourra par exemple utiliser une dichotomie.

sont au nombre de environ  $(Z.N)$  par états de base<sup>16</sup>. On pourra trouver des précisions sur la méthode de Lanczos dans le cours de Chatelin [36] où se trouvent aussi traitées d'autres techniques de diagonalisation et le cas où les états sont dégénérés.

---

<sup>16</sup>où  $Z$  est la connectivité du réseau



## Deuxième partie

# Systèmes bidimensionnels de petites tailles sur réseau





# Chapitre 4

## Théorie de perturbation dans la limite du cristal de Wigner

---

Dans ce chapitre nous considérerons que les interactions sont dominantes et nous allons traiter la partie cinétique du hamiltonien en théorie de perturbation. Anderson est le premier à étudier cette limite pour expliquer le super-échange dans les mauvais conducteurs [6]. Un tel développement donne des dépendances en puissance de  $(t/U)$  des observables. Il permet de donner de nombreux résultats qualitatifs dans la limite de forte interaction.

On décompose le hamiltonien  $H$  en :

$$H = H_\infty + H_K$$

avec  $H_K$  la partie cinétique perturbative et  $H_\infty = H_V + H_U$  comprenant l'énergie d'interaction Coulombienne et le terme de désordre. Une très forte interaction répulsive conduit l'état fondamental du système à une réorganisation en cristal de Wigner, avec des charges localisées sur les sites du réseau et réparties de manière à minimiser l'énergie électrostatique (voir chapitre (1.2)). Dans la limite continue et en dimension deux, un tel cristal aura une structure triangulaire. Dans un premier temps, on présentera la théorie de perturbation avec désordre qui est plus simple. On considérera que le seul effet du désordre est d'accrocher le cristal sur les sites qui minimisent son énergie potentielle de désordre. Puis on traitera l'effet d'un désordre perturbatif et on estimera le seuil à partir duquel le désordre détruit l'ordre cristallin. On calculera alors le courant permanent dans le système. Dans un second temps, on traitera le cas sans désordre où le cristal est alors dégénéré par translation, en l'absence d'énergie cinétique. Les dégénérescences compliquent la théorie de perturbation, on le verra notamment pour l'obtention du hamiltonien effectif de spin.

### 4.1 Développement de l'énergie sur réseau

$H_\infty$  est diagonale dans la base des états  $|\psi_\alpha\rangle$  :

$$|\psi_\alpha\rangle = \left( \prod_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^+)^{n_{i,\sigma}(\alpha)} \right) |\emptyset\rangle \text{ et } H_\infty |\psi_\alpha\rangle = E_\alpha |\psi_\alpha\rangle \quad (4.1)$$

Les états  $|\psi_\alpha\rangle$  sont les déterminants de Slater construits à partir de  $N$  opérateurs de création sur les sites. Ils sont totalement déterminés par les nombres d'occupation  $n_{i,\sigma}(\alpha) (\in \{0, 1\})$  qui vérifient  $N = \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}(\alpha)$ . L'état fondamental  $|\psi_0\rangle$  est donné par la configuration  $\{n_{i,\sigma}\}$  qui minimise à la fois l'énergie électrostatique et celle due au désordre. Il est important de réaliser que la structure de l'état fondamental ne dépend alors que de la géométrie du réseau (triangulaire, carré, kagomé, etc.), de la taille de la boîte et du nombre de particules  $N$ . Connaissant l'état fondamental sans énergie cinétique  $|\psi_0\rangle$ , on peut suivre les variations de son énergie et de sa fonction d'onde lorsque l'on branche adiabatiquement l'hamiltonien perturbatif  $H_K$ .

#### 4.1.1 Développement de l'énergie fondamentale à l'ordre $n$

On considère dans un premier temps la théorie de perturbation dans le cas d'un état fondamental non dégénéré. On considère donc pour l'instant que les particules sont sans spin. La théorie de perturbation donne le développement de l'énergie suivant (voir par exemple [96]) :

$$\begin{aligned} E_0(H_K) &= \sum_n E_0^{(n)}(H_K) \\ E_0^{(n)}(H_K) &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}} \frac{\langle \psi_0 | H_K | \psi_{\alpha_1} \rangle \langle \psi_{\alpha_1} | H_K | \psi_{\alpha_2} \rangle \dots \langle \psi_{\alpha_{n-1}} | H_K | \psi_0 \rangle}{(E_0 - E_{\alpha_1})(E_0 - E_{\alpha_2}) \dots (E_0 - E_{\alpha_{n-1}})} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Ces sommes contiennent les éléments de matrice  $\langle \psi_{\alpha_k} | H_K | \psi_{\alpha_{k+1}} \rangle$  du hamiltonien perturbatif. Ces éléments de matrice sont non-nuls uniquement dans le cas où les états  $|\psi_{\alpha_k}\rangle$  et  $|\psi_{\alpha_{k+1}}\rangle$  ne diffèrent que par le saut d'une particule sur un site contiguë (voir figure (4.1)). Ces éléments de matrice valent  $(-t)$  lorsque l'on ne tient pas compte de l'ordre des opérateurs  $c_{i,\sigma}^+$ . Donc de nombreux termes de l'équation (4.2) sont nuls. Un terme non-nul d'ordre  $n$  définit une suite  $S_n = (\Psi_{\alpha_1}, \Psi_{\alpha_2}, \dots, \Psi_{\alpha_n})$  de  $n$  états dans l'espace de Hilbert déformant le cristal de Wigner par saut d'une particule et revenant à ce dernier au  $n$ -ième saut. Ces suites peuvent être assimilées aux chemins que décrivent les particules (dans l'espace des positions) qui vont d'un point à un autre du cristal, comme cela est montré dans la figure (4.2).

D'autre part, quand au bout des  $n$  sauts on retrouve la configuration de l'état fondamental, l'ordre des opérateurs  $c_{i,\sigma}^+$  peut être modifié (voir figure (4.2)). Or pour un ensemble de fermions, les opérateurs anti-commutent. L'état final est donc égal à l'état initial  $|\psi_\alpha\rangle$  à un signe  $\pm 1$  près. Ce signe est donné par la signature de la permutation d'opérateurs  $P_s$ , nécessaire au rétablissement de l'ordre de l'état initial. On peut voir un exemple de chemin  $S$  et de permutation d'opérateurs  $P_S$  dans la figure (4.2).

Sachant que l'énergie de déformation due au potentiel Coulombien est proportionnelle à  $U$  ; on définit  $Ue_{\alpha_i}$  comme la différence entre l'énergie d'interaction de l'état fondamental et celle

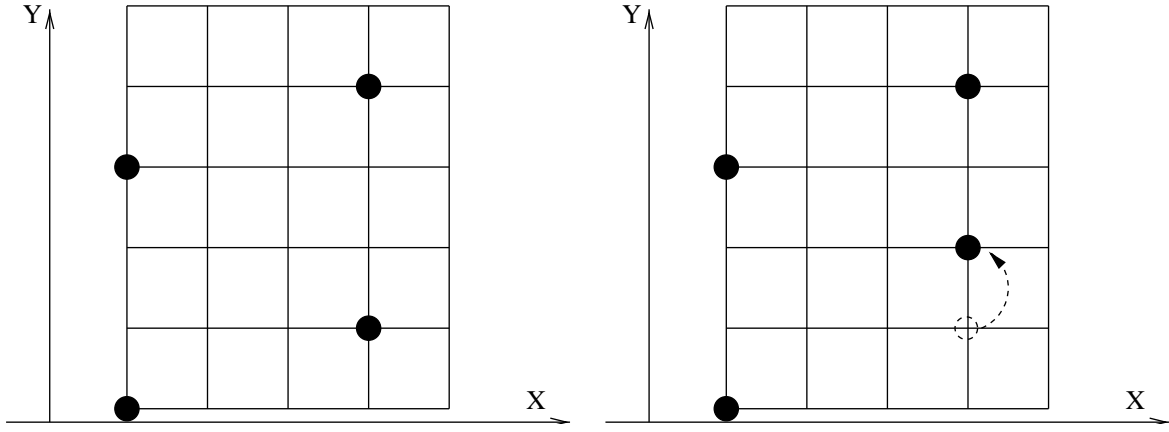


FIG. 4.1: Deux états  $\Psi_{\alpha_i}$  et  $\Psi_{\alpha_{i+1}}$  couplés par le terme cinétique  $\langle \psi_{\alpha_i} | H_K | \psi_{\alpha_{i+1}} \rangle$ .

de l'état excité  $|\psi_{\alpha_i}\rangle$ . Si on néglige l'effet du désordre, on peut écrire :  $E_0 - E_{\alpha_i} = -Ue_{\alpha_i}$  avec  $e_{\alpha_i} > 0$  et  $W = 0$ . On estime alors la dépendance en  $\frac{t}{U}$  de l'énergie à l'ordre  $n$  :

$$E_0^{(n)}(H_K) = -\frac{t^n}{U^{n-1}} \sum_{S_n} \text{sign}(P_S) \left[ \prod_{i=1}^{n-1} e_{\alpha_i} \right]^{-1} \quad (4.3)$$

#### 4.1.2 Effet d'un désordre faible

Dans le développement (4.2), les termes de désordre apparaissent explicitement au dénominateur dans les différences d'énergies  $(E_0 - E_{\alpha_i})$ . La contribution du désordre vient de la différence entre la somme des potentiels des sites occupés par l'état fondamental  $|\Psi_0\rangle$  et la somme des potentiels des sites occupés par l'état intermédiaire  $|\Psi_{\alpha_i}\rangle$ . On peut tenir compte de la force du désordre  $W$  dans le cas où cette dernière reste perturbative devant l'interaction ( $W \ll U$ ), car l'état fondamental reste le cristal de Wigner.  $n_j(\alpha_i) = (0; 1)$  étant l'occupation du site  $j$  par l'état  $|\Psi_{\alpha_i}\rangle$ , on obtient que :

$$\begin{aligned} E_0 - E_{\alpha_i} &= -Ue_{\alpha_i} \left( 1 + \frac{W}{U} v_{\alpha_i} \right) = -U\tilde{e}_{\alpha_i} \\ v_{\alpha_i} &= \frac{\sum_j v_j (n_j(\alpha_i) - n_j(0))}{e_{\alpha_i}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Et donc la moyenne sur le désordre du développement de l'énergie à l'ordre  $n$  est donnée par :

$$\langle E_{0W}^{(n)}(H_K) \rangle = -\frac{t^n}{U^{n-1}} \sum_{S_n} \text{sign}(P_S) \left[ \prod_{i=1}^{n-1} e_{\alpha_i} \right]^{-1} \left( 1 - \frac{W}{U} \sum_{\alpha_i \in S_n} \langle v_{\alpha_i} \rangle + o\left(\frac{W}{U}\right)^2 \right) \quad (4.5)$$

La configuration du fondamental minimisant aussi l'énergie potentielle de désordre, on remarque que en moyenne  $\langle v_{\alpha_i} \rangle > 0$ .

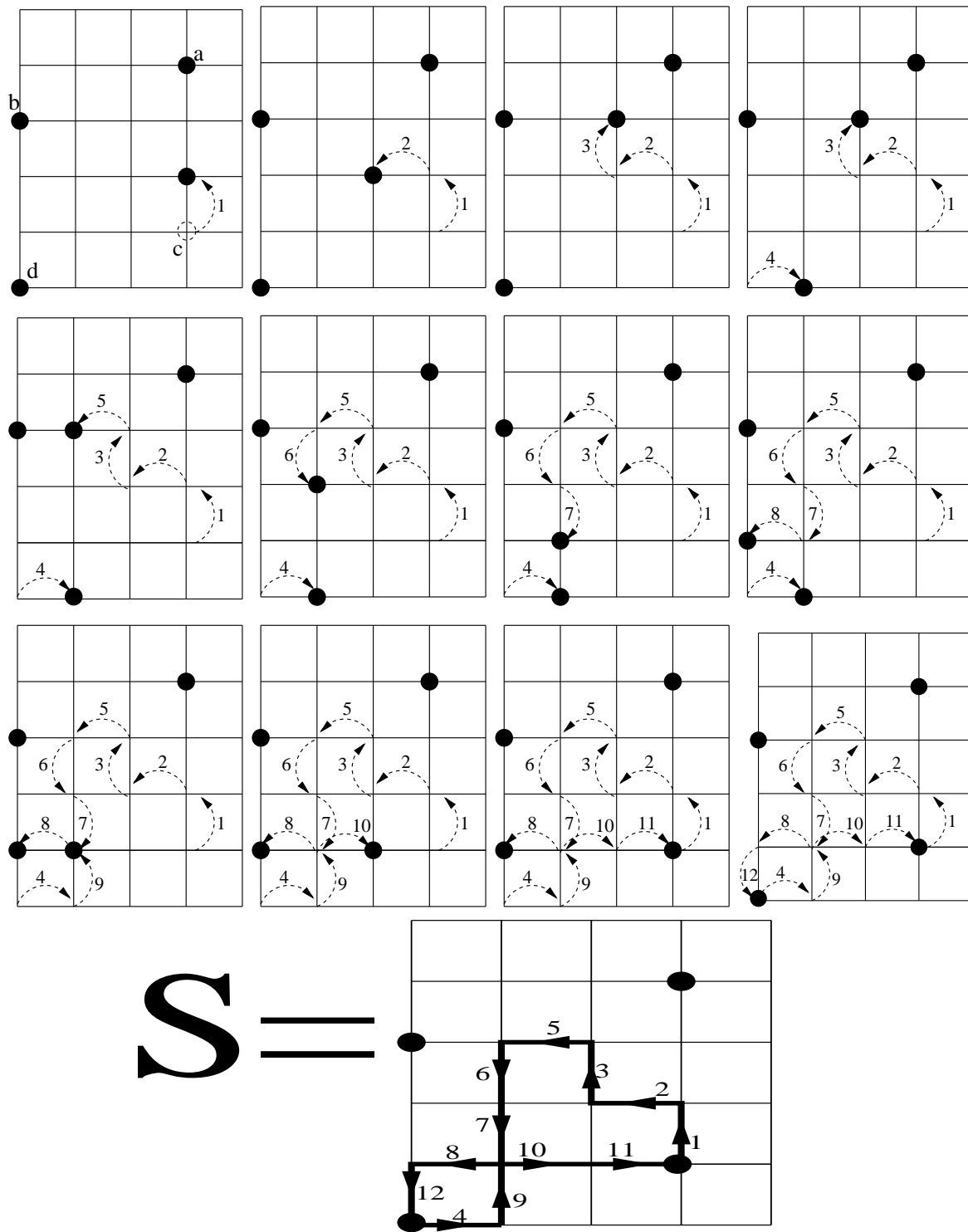


FIG. 4.2: 12 premières figures de gauche à droite : Suite  $S$  d'états contribuant à l'ordre 12.  $S$  peut être représenté par le chemin surligné et numéroté (dernière figure). Dans  $S$ , on part de l'état  $c_a^+ c_b^+ c_c^+ c_d^+ |\emptyset\rangle$  pour arriver à l'état  $c_a^+ c_b^+ c_d^+ c_c^+ |\emptyset\rangle$  où l'on a échangé deux particules (et donc leur opérateur  $c^+$  respectif). L'état obtenu est l'état initial au facteur ( $\text{sign}(P_s) = -1$ ) près.

## 4.2 Calculs des courants permanents dans la limite de forte interaction

Le courant permanent longitudinal est engendré par un flux magnétique<sup>1</sup> $\Phi_x$  (voir paragraphe (1.4.2)). A température nulle, il est donné par :

$$I(\phi_x) = - \left. \frac{\partial E_0}{\partial \phi} \right|_{\phi=\phi_x} \quad (4.6)$$

où  $E_0$  est l'énergie fondamentale du système à N-corps. Le courant permanent mesure donc la dépendance de l'état fondamental vis à vis d'un flux magnétique. L'effet d'un flux pouvant être réinterprété comme un changement de conditions aux bords, le courant permanent mesure aussi la sensibilité du fondamental aux changements de conditions de bords. Kohn a relié cette sensibilité à la conductivité optique du système [71].

La partie  $H_0$  du hamiltonien est insensible au flux. Seul  $H_K$  possède aux bords des termes qui dépendent du flux, comme indiqué ci-dessous :

$$\begin{aligned} H_K(\phi_x, \phi_y) = & -t \sum_{\sigma} \left( \sum_{x=1}^{L_x} \sum_{y=2}^{L_y} c_{(x,y);\sigma}^+ c_{(x,y-1);\sigma} + \sum_{x=2}^{L_x} \sum_{y=1}^{L_y} c_{(x,y);\sigma}^+ c_{(x-1,y);\sigma} \right. \\ & \left. + e^{-i\phi_y} \sum_{x=1}^{L_x} c_{(x,1);\sigma}^+ c_{(x,L_y);\sigma} + e^{-i\phi_x} \sum_{y=1}^{L_y} c_{(1,y);\sigma}^+ c_{(L_x,y);\sigma} + \text{H.C.} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

On utilisera explicitement  $\Phi_y$  dans le calcul du courant transverse. Jusqu'à là, on le prendra toujours nul :  $\Phi_y = 0$ . On veut calculer perturbativement à l'ordre  $n$  le courant permanent  $I^{(n)}$ . Il suffit de trouver les termes  $E_0^{(n)}(\Phi_x)$  dépendant du flux dans le développement perturbatif à l'ordre  $n$  de l'énergie car :

$$I^{(n)}(\phi_x) = - \frac{\partial E_0^{(n)}}{\partial \phi_x} \quad (4.8)$$

On voit dans l'équation (4.2) que l'énergie à l'ordre  $n$ , s'écrit comme une somme sur les suites  $S$  d'états de différents quotients. Ces quotients sont formés par un numérateur que l'on notera Num( $S$ ) et par un dénominateur Den( $S$ ) :

$$E_0^{(n)} = \sum_S \frac{\text{Num}(S)}{\text{Den}(S)} \quad (4.9)$$

Les  $n$  éléments de matrices de sauts  $\langle \psi_{\alpha_i} | H_K | \psi_{\alpha_{i+1}} \rangle$ , qui se trouvent dans les termes Num( $S$ ), sont les seuls pouvant contenir des dépendances en flux. Pour une suite  $S$ , on appellera  $h_f$  le nombre de sauts pour lesquels une particule traverse le bord<sup>2</sup> de la gauche vers la droite

<sup>1</sup>On considérera que le flux magnétique  $\Phi_x$  est engendré par un potentiel vecteur orienté dans la direction  $\vec{x}$ , on a alors la condition de bord généralisée :  $c_{(L_x,y);\sigma} = \exp(i\phi_x) c_{(1,y);\sigma}$

<sup>2</sup>Le bord de l'échantillon, se situe entre les sites  $(L_x, y)$  et les sites  $(1, y)$ . Un saut de la gauche vers la droite part du site  $(L_x, y)$  pour arriver au site  $(1, y)$  alors qu'un saut de la droite vers la gauche part du site  $(1, y)$  pour aller au site  $(L_x, y)$ .

(avec un élément de matrice  $-te^{-i\Phi_x}$ ). De même, on note  $h_b$  le nombre de sauts de  $S$  où une particule traverse le bord par la gauche (avec un élément de matrice  $-te^{+i\Phi_x}$ ). On pourra écrire :

$$\text{Num}(S) = \text{sign}(P_S) (-t)^n \exp[-i\phi_x(h_f - h_b)] ; \text{Den}(S) = U^n \prod_{i=1}^{n-1} \tilde{e}_{\alpha_i} \quad (4.10)$$

On constate donc que seules les suites d'états vérifiant  $h_f - h_b \neq 0$ , apportent une contribution à la dépendance en flux. Le dénominateur  $\text{Den}(S)$  s'écrit comme un produit de  $U^n$  avec des termes  $\tilde{e}_{\alpha_i}$  ou  $e_{\alpha_i}$  selon que l'on considère ou non les corrections dues au désordre.

### 4.2.1 Calcul du courant permanent longitudinal

#### Termes contribuant au développement perturbatif

Pour calculer le courant permanent, on doit déterminer les termes du développement perturbatif de  $E_0$  qui dépendent du flux. On a vu que chaque terme correspond à une suite  $S$  d'états intermédiaires liés par un terme de saut, partant de l'état fondamental pour y revenir. Si on considère une suite  $S$  où aucun chemin suivi par une particule ne fait le tour du tore : toute particule traversant un bord dans un sens, le retransverse nécessairement dans l'autre sens et ainsi  $h_b = h_f$ . Cette suite  $S$  ne contribue donc pas à la dépendance en flux. Les chemins qui contribuent doivent nécessairement faire le tour du tore suivant la direction  $\vec{x}$  et ainsi entourer le flux. Chaque terme de saut amène une dépendance en  $(t/U)$  supplémentaire. Donc plus un chemin est long plus sa contribution possède un ordre élevé en théorie de perturbation. Les termes d'ordre le plus faible dépendants du flux proviennent donc des chemins les plus courts, faisant le tour du flux, où les particules se déplacent sur les lignes d'ordonnées constantes :  $y = \text{constante}$  (voir figure 4.3). Un tour où les particules restent sur une même ligne est constitué de  $L_x$  sauts au minimum<sup>3</sup>. Le premier terme ayant une contribution en flux est donc d'ordre  $n = L_x$ . Cette constatation avait déjà été faite par Tsiper et Efros pour l'étude de petits systèmes [146].

Considérons un nombre  $N_y$  de particules sur une ligne d'ordonnée constante et une suite  $S$  d'ordre minimal  $L_x$  dépendant du flux. La suite de sauts  $S$  conduit à une permutation cyclique sur l'ordre des particules. Le signe associé à cette suite est donc  $\text{sign}(P_S) = (-1)^{N_y-1}$ . On obtient alors pour la dépendance en flux de l'énergie de l'état fondamental à l'ordre le plus bas :

$$E_0^{(L_x)}(\phi_x) \approx - \sum_S \frac{t^{L_x} \text{sign}(P_S) \exp[-i\phi_x(h_f - h_b)]}{U^{L_x-1} e_{\alpha_1} e_{\alpha_2} \dots e_{\alpha_{L_x-1}}} . \quad (4.11)$$

On n'a en fait que deux types de suites  $S$  possibles. Celles engendrées par une permutation cyclique vers la droite, que l'on nommera  $S_d$ , et celles engendrées par la permutation cyclique vers la gauche  $S_g$ . Pour  $S_d$ , seule la particule la plus à droite traverse le bord pour

---

<sup>3</sup> Chaque particule sur la ligne gagne, par une série de sauts, la position de son voisin le plus proche ; toutes les particules allant dans la même direction

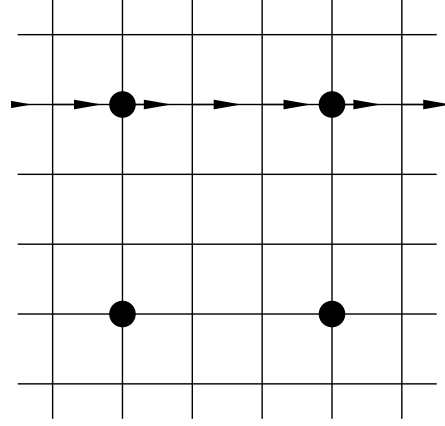


FIG. 4.3: 4 particules sur un réseau de  $6 \times 6$  sites. La configuration du cristal de Wigner est carrée et régulière. Les flèches non-numérotées indiquent l'ensemble des suites de 6 sauts contribuant au courant permanent à l'ordre le plus bas. La contribution est ici en  $(t^6/U^5)$ .

venir prendre la place de celle qui est le plus sur la gauche, les autres prennent la place de leur voisin de droite sans traverser le bord. On a alors pour  $S_d$  le couple  $(h_f = 1; h_b = 0)$ . Par symétrie on a pour  $S_g$  ( $h_f = 0; h_b = 1$ ). A chaque suite de type  $S_d$ , on peut associer la suite symétrique de  $S_g$  qui ne diffère alors que par le signe du facteur de phase. Par exemple si  $S_d = \{|\Psi_{\alpha_1}\rangle, |\Psi_{\alpha_2}\rangle, \dots, |\Psi_{\alpha_{L_x-2}}\rangle, |\Psi_{\alpha_{L_x-1}}\rangle\}$  alors la suite symétrique est  $S_g = \{|\Psi_{\alpha_{L_x-1}}\rangle, |\Psi_{\alpha_{L_x-2}}\rangle, \dots, |\Psi_{\alpha_2}\rangle, |\Psi_{\alpha_1}\rangle\}$ . Il suffit donc d'évaluer les termes  $S_d$  pour obtenir :

$$E_0^{(L_x)}(\phi_x) \approx -2 \frac{t^{L_x}}{U^{L_x-1}} \sum_{S_d} \frac{\text{sign}(P_S) \cos \phi_x}{e_{\alpha_1} e_{\alpha_2} \dots e_{\alpha_{L_x-1}}} \quad (4.12)$$

### Courant permanent à l'ordre le plus bas ( $L_x$ ) - Signe du courant

Une dérivation de l'expression ci-dessus amène directement à l'expression du courant permanent à l'ordre le plus bas :

$$\begin{aligned} I^{(L_x)}(\phi_x) &= \tilde{I}^{(L_x)} \sin \phi_x \\ \tilde{I}^{(L_x)} &\approx -2 \frac{t^{L_x}}{U^{L_x-1}} \sum_{S_d} \frac{\text{sign}(P_S)}{e_{\alpha_1} e_{\alpha_2} \dots e_{\alpha_{L_x-1}}} . \end{aligned} \quad (4.13)$$

On peut tirer de cette expression plusieurs résultats intéressants :

- La dépendance en flux est  $2\pi$ -périodique et sinusoïdale, à l'ordre le plus bas. En effet pour avoir des contributions en  $\{m\Phi_x, m \in \mathbb{Z}\}$ , on doit faire  $m$  fois le tour du tore. Ces contributions viennent donc à l'ordre  $mL_x$  de la théorie de perturbation.
- L'amplitude du courant permanent décroît en loi de puissance proportionnellement à  $\frac{t^{L_x}}{U^{L_x-1}}$ , dans la limite du cristal de Wigner. Pour calculer exactement le préfacteur, il suffit de dénombrer les suites d'états  $S_d$  et de calculer les différents  $e_\alpha$  correspondants, suivant l'équation (4.5).

• Chaque terme  $S_d$  de la somme correspond à une permutation sur une certaine ligne  $y$ , et apporte une contribution possédant le signe  $-1 \times \text{sign}(P_{S_d}) = (-1)^{N_y}$ . On peut donc réécrire le courant comme la somme des contributions de chaque ligne :

$$\begin{aligned} \tilde{I}^{(L_x)} &\propto \frac{t^{L_x}}{U^{L_x-1}} \sum_{y=1}^{L_y} A(y) (-1)^{N_y} \\ A(y) &= 2 \sum_{S_f(y)} \left[ \prod_{i=1}^{L_x-1} e_{\alpha_i} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Avec cette écriture on retrouve, dans le cas unidimensionnel, le théorème de Legett pour le signe du courant permanent de fermions sans spin [83] (voir paragraphe (1.4.2)).

• Le signe, donné par le résultat de l'équation ci-dessus, n'est pas trivial en dimension 2. Toutefois, si on suppose que la contribution de tous les termes  $\left[ \prod_{i=1}^{L_x-1} e_{\alpha_i} \right]$  est donnée par leur contribution moyenne, que l'on notera  $[\bar{e}]^{(L_x-1)}$ , l'amplitude  $A(y)$  d'une ligne  $y$  est alors proportionnelle au nombre  $N_{\text{Suite}}(N_y)$  de suites faisant une permutation cyclique des  $N_y$  particules vers la droite :  $A(y) = 2 [\bar{e}]^{(1-L_x)} N_{\text{Suite}}(N_y)$ .

Le signe sera alors donné par le signe de l'expression :

$$\text{signe}(I) \equiv \sum_{y=1}^{L_x} N_{\text{Suite}}(N_y) (-1)^{N_y} \quad (4.15)$$

Dans la limite de faible densité  $\frac{N_y}{L_x} \ll 1$ ,  $N_{\text{Suite}}(N_y)$  est approximativement donné par le nombre de possibilités, qu'ont  $N_y$  particules, de faire chacune  $\frac{L_x}{N_y}$  sauts vers la droite dans n'importe quel ordre. On obtient à des corrections<sup>4</sup> près :  $N_{\text{Suite}}(N_y) = \left( \frac{L_x!}{[(\frac{L_x}{N_y})!]^{N_y}} - \text{corrections} \right)$ .  $N_{\text{Suite}}(N_y)$  augmente exponentiellement avec  $N_y$  aux faibles remplissages, puis plus lentement jusqu'au demi-remplissage  $N_y = L_x/2$ . Au dessus du demi-remplissage il décroît de manière symétrique par rapport au demi-remplissage<sup>5</sup>. On appelle  $N_y^{\text{max}}$  le nombre de particules pour lequel  $N_{\text{Suite}}$  est maximal<sup>6</sup>. Etant donné la variation très rapide de  $N_{\text{Suite}}(N_y)$ , le signe du courant permanent est typiquement donné par l'expression  $(-1)^{N_y^{\text{max}}}$ . Ainsi à faible remplissage le nombre maximal de particules sur une ligne donne le signe du courant.

### Une vérification du calcul perturbatif sur la sensibilité de phase $D$

Une étude numérique [14] entreprise sur 4 fermions sans spin sur un réseau composé de  $6 \times 6$  sites pour un désordre fort a montré que l'amplitude du courant longitudinal décroît à forte interaction. De plus le courant devient paramagnétique pour tous les échantillons

<sup>4</sup> Les termes de *corrections*, négligeables dans la limite diluée, sont dus au fait que pour atteindre la position de son voisin de droite, une particule doit attendre que ce dernier ait fait son premier saut, ces termes diminuent donc le nombre de suites possibles. Par exemple dans le cas  $N_y = 2$  on a exactement  $N_{\text{Suite}}(2) = \frac{L_x!}{[(\frac{L_x}{2})!]^2} - 2$ .

<sup>5</sup> Au dessus du demi-remplissage, le nombre de suites se calcule à l'aide des trous, et non plus des particules.

<sup>6</sup>  $N_{\text{Suite}}(N_y^{\text{max}}) = M_{N_y}^{\text{ax}} N_{\text{Suite}}(N_y)$



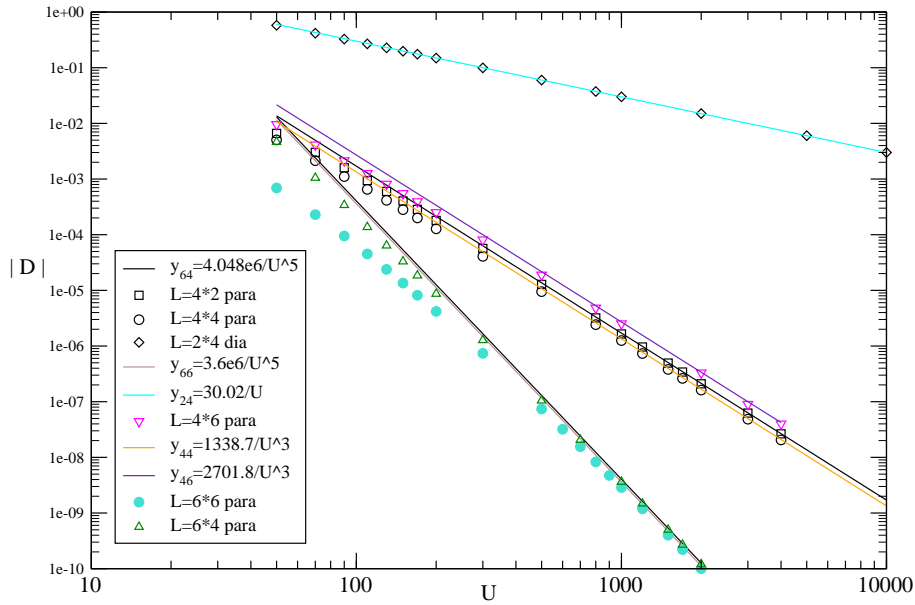


FIG. 4.4: Valeur absolue de la sensibilité de phase  $|D|$ , pour 4 particules sans spin sur des réseaux de différentes tailles  $L = L_x * L_y$ . La force du désordre est  $W = 5$ . Le signe du courant est donné dans la légende.

indépendamment de la réalisation du désordre. Des conclusions similaires [17] ont été tirées pour un échantillon de taille  $4 \times 4$  à demi-remplissage : le courant est de signe constant au dessus d'une certaine force des interactions.

Le calcul développé dans le paragraphe précédent donne immédiatement une explication à ces constatations. Dans le cas de 4 particules dans un réseau  $6 \times 6$ , l'état fondamental du cristal de Wigner est décrit dans la figure (4.3). Les particules sont disposées sur deux lignes, avec deux particules par ligne ( $N_y = 2$ ). Le signe pour toutes les suites sera identique ( $(-1)^2 = +1$ ) ce qui donne bien un courant paramagnétique. De plus on prévoit aussi que la décroissance suit la loi  $t^6/U^5$ . Un calcul exact des contributions des 18 suites d'états associées à chaque ligne donne :

$$\tilde{I}^{(6)} \approx 1.808 \times 10^6 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.16)$$

On a vérifié numériquement la validité du calcul sur des systèmes de tailles différentes, que l'on notera génériquement  $L = L_x \times L_y$ . On calcule la sensibilité de phase  $D$  qui est une moyenne sur la phase du courant :

$$D = E(0) - E(\pi) = - \int_0^\pi I(\Phi) d\Phi = 2\tilde{I} \quad (4.17)$$

En diagonalisant exactement le problème, on obtient la sensibilité exacte (tracée à l'aide de symboles sur la figure (4.4)). On a écrit et tracé le résultat du calcul à l'ordre le plus bas (en trait plein) que l'on note  $y_{L_x L_y}$ . On retrouve le signe et les décroissances attendues pour le courant à forte interaction. Comme le signe s'établit à des interactions faibles [14,17] puis reste

constant quand la force des interactions  $U$  augmente, ce développement perturbatif permet donc d'obtenir le signe du courant dans un régime non-perturbatif.

### Effet du désordre sur l'amplitude des courants

Jusqu'à présent, on a considéré que le désordre accroche le cristal et lève la dégénérescence par translation de l'état fondamental. On donne ici les corrections en  $(W/U)$  apportées par la force du désordre. Pour l'énergie ces corrections ont été traitées dans le paragraphe (4.1.2). On en déduit alors pour le courant :

$$I_W^{(L_x)} \approx -2 \frac{t^{L_x}}{U^{L_x-1}} \sum_{S_f} \text{sign}(P_{S_d}) \left[ \prod_{i=1}^{L_x-1} e_{\alpha_i} \right]^{-1} \left( 1 - \frac{W}{U} \sum_{\alpha_i \in S_d} \langle v_{\alpha_i} \rangle + o\left(\frac{W}{U}\right)^2 \right) \quad (4.18)$$

Le cristal de Wigner étant accroché sur la position qui minimise l'énergie de désordre, les  $\langle v_{\alpha_i} \rangle$  sont strictement positifs. La première correction en désordre est donc linéaire (en  $(W/U)$ ) et négative. On constate donc bien le résultat intuitif<sup>7</sup> que le courant longitudinal diminue quand le désordre augmente.

On a vérifié ces comportements dans la figure (4.5), ainsi que la loi de puissance en  $U$  de la première correction en désordre dans l'insert. On obtient les bonnes dépendances pour  $W \neq 0$ . On constate, par contre, que ce calcul n'est plus valable pour  $W = 0$  où l'état fondamental est dégénéré : si on appelle  $D_{0th}$  la sensibilité de phase calculée à l'aide de l'équation (4.18), elle diffère de la valeur calculée numériquement par un facteur de l'ordre de 2 (voir figure (4.5)).

### Cas sans désordre : $W = 0$

Dans le cas sans désordre et sans énergie cinétique ( $H_K = 0$ ), l'état fondamental est dégénéré. On a un nombre<sup>8</sup>  $n_D$  de cristaux de Wigner de même énergie, superposables par translation. On notera l'ensemble de ces états  $\{|\psi_0^{(\beta)}\rangle, \beta = 1, \dots, n_D\}$ . Quand l'énergie cinétique devient non-nulle, les termes de saut de  $H_K$  couplent ces états dégénérés en théorie de perturbation. On appellera  $p$  l'ordre minimal auquel sont couplés les différents états  $\{|\psi_0^{(\beta)}\rangle$  en théorie de perturbation. Ces couplages perturbatifs lèvent cette dégénérescence sur les états, le nouvel état fondamental étant une combinaison linéaire des états dégénérés. Comme on s'intéresse à l'effet de la dégénérescence sur le courant permanent, on est amené à comparer l'ordre  $p$  de levée de dégénérescence et l'ordre  $L_x$  où apparaît le courant permanent.

Si  $p > L_x$ , alors on peut ignorer la levée de dégénérescence puisqu'elle arrive à un ordre supérieur. La théorie de perturbation s'applique comme s'il n'y avait pas de dégénérescence. En pratique, on utilise les équations (4.13) avec un des états dégénérés<sup>9</sup>.

Si  $p \leq L_x$ , alors on doit trouver le nouveau fondamental pour lui appliquer la théorie de perturbation. Pour cela on diagonalise la matrice effective des couplages  $M$  dans le sous-espace

<sup>7</sup>En effet, quand la force du désordre augmente la localisation des fonctions d'onde augmente aussi, on s'attend donc à ce que le courant diminue.

<sup>8</sup>Ce nombre dépend essentiellement du nombre de particule et de la taille du système.

<sup>9</sup>Le résultat serait identique si l'on utilisait une combinaison linéaire arbitraire des états dégénérés.

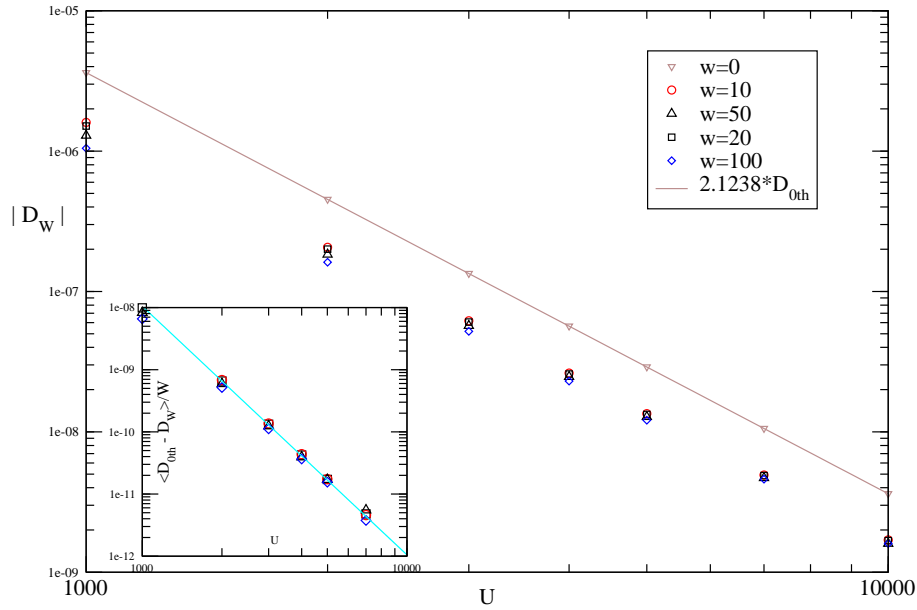


FIG. 4.5: Valeur absolue de la sensibilité de phase  $|D_W|$ , pour 4 particules sans spin sur des réseaux de taille  $L = 4 \times 2$ , pour différents désordre  $W$ . Les symboles sont les résultats exacts.  $D_{0th}$  est l'expression obtenue en prenant  $W = 0$  dans l'équation(4.18). Dans l'insert on trace  $|D_{0th} - D_W|/W$ . On constate bien (suivant l'équation(4.18)) que cette quantité est indépendante du désordre et décroît en  $U^{L_x} = U^{-4}$ . On a donc bien une dépendance linéaire en désordre.

des états dégénérés :

$$M_{\beta, \beta'} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{p-1}} \frac{\langle \psi_0^{(\beta)} | H_K | \psi_{\alpha_1} \rangle \langle \psi_{\alpha_1} | H_K | \psi_{\alpha_2} \rangle \dots \langle \psi_{\alpha_{p-1}} | H_K | \psi_0^{(\beta')} \rangle}{(E_0 - E_{\alpha_1})(E_0 - E_{\alpha_2}) \dots (E_0 - E_{\alpha_{p-1}})} \quad (4.19)$$

La diagonalisation nous donne un nouvel état fondamental  $|\psi_0\rangle$  que nous pouvons écrire sous la forme :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\beta=1}^{n_D} f_{\beta} |\psi_0^{(\beta)}\rangle \quad \text{with} \quad \sum_{\beta} |f_{\beta}|^2 = 1 \quad (4.20)$$

La théorie de perturbation appliquée à ce nouvel état fondamental est alors différente du cas avec désordre, puisque la correction à l'ordre  $n$  de l'énergie s'écrit :

$$E_0^{(n)}(W=0) = \sum_{\beta, \beta'} f_{\beta}^* f_{\beta'} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}} \frac{\langle \psi_0^{(\beta)} | H_K | \psi_{\alpha_1} \rangle \langle \psi_{\alpha_1} | H_K | \psi_{\alpha_2} \rangle \dots \langle \psi_{\alpha_{n-1}} | H_K | \psi_0^{(\beta')} \rangle}{(E_0 - E_{\alpha_1})(E_0 - E_{\alpha_2}) \dots (E_0 - E_{\alpha_{n-1}})} \quad (4.21)$$

Dans la figure (4.5), on voit un exemple où un couplage dépendant du flux, entre états dégénérés, apparaît à l'ordre le plus bas en courant permanent :  $p = L_x = 4$ . Dans ce cas on



FIG. 4.6: Deux états du cristal de Wigner dégénérés, couplés par un processus à deux saut.

n'a pas de changement de loi de puissance pour le courant, qui est toujours proportionnel à  $(t^{L_x}/U^{L_x-1})$ , mais le nombre plus grand de processus<sup>10</sup> entraîne une augmentation du courant par rapport au cas désordonné. On trouve, dans ce cas précis, le rapport de proportionnalité  $\tilde{I}^{(4)}(W=0) \approx 2.1238 \tilde{I}^{(4)}$  qui est bien vérifié dans la figure (4.5). Il existe des cas où  $p$  est inférieur à  $L_x$ . On illustre ce point en considérant 3 particules dans un système de taille  $L = 4 \times 2$ . Ce système possède plusieurs états dégénérés, on en dessine deux dans la figure (4.6). En présence de désordre, l'état de droite est couplé à lui-même, par un processus où la particule du haut fait 4 sauts vers la droite ou la gauche. Ce couplage est<sup>11</sup> proportionnel à  $(t^4/(WU^2))$ . Sans désordre, les états de la figure (4.6) sont dégénérés ; ils sont couplés par un processus de deux sauts donc la dépendance est proportionnelle à  $(t^2/U)$ . On vérifie ce changement de comportement asymptotique sur la figure (4.7).

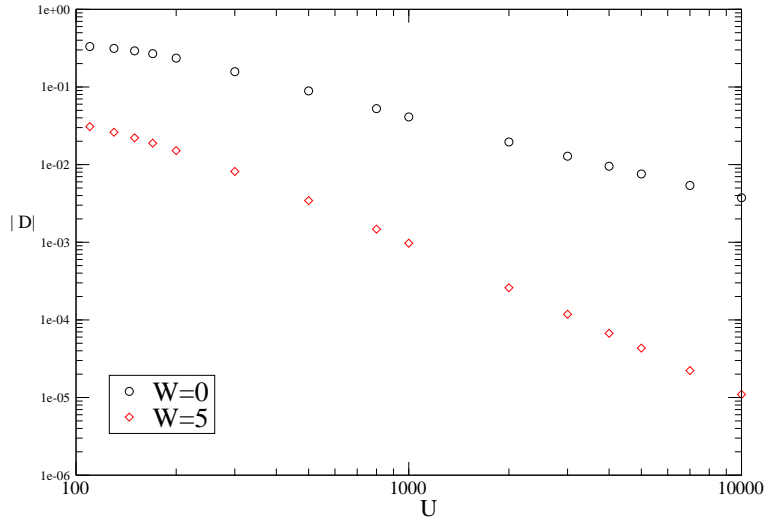


FIG. 4.7: Changement de comportement asymptotique du courant avec et sans désordre pour 3 particules dans  $L = 4 \times 2$ . Le courant est diamagnétique dans les deux cas.

<sup>10</sup>On doit aussi tenir compte de tous les termes avec  $\beta \neq \beta'$ .

<sup>11</sup>Quand la particule du haut a fait deux sauts, elle est sur un état qui serait dégénéré s'il n'y avait pas de désordre, et donc  $e_\alpha = 0$ . Le terme de désordre domine, c'est pourquoi il apparaît explicitement dans la formule.

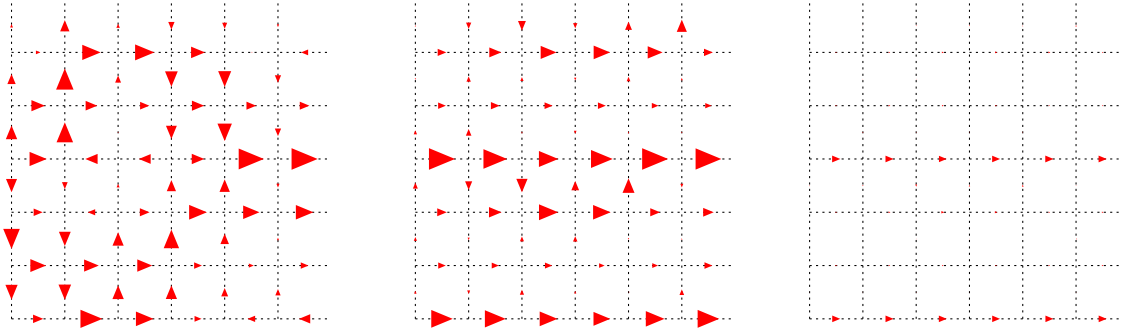


FIG. 4.8: Courants locaux dans un échantillon pour différentes forces des interactions pour 4 particules avec spins dans le sous-espace  $S_z = 0$ . De gauche à droite  $r_s = 0; 12; 50$ .

#### 4.2.2 Courants transverses

Sans désordre et sans flux dans la direction  $y$  ( $\Phi_y = 0$ ), le courant transverse dans la direction  $y$  est nul par symétrie. Le désordre brise cette symétrie et un courant transverse non-nul, induit par un flux dans la direction  $\vec{x}$ , peut être observé pour chaque réalisation du désordre. Une moyenne sur le désordre restaure la symétrie et annule le courant. Des études [14, 17] ont montré l'existence de ces courants transverses qui disparaissent plus rapidement que les courants longitudinaux quand on augmente l'interaction. Quand on observe dans un échantillon les courants locaux<sup>12</sup>, comme dans la figure (4.8), on constate un alignement des courants à une interaction intermédiaire, puis une disparition des courants à forte interaction. On peut expliquer que le courant transverse disparaît plus rapidement, par un calcul perturbatif à forte interaction. Le courant transverse induit par un flux  $\Phi_x$  est défini comme suit :

$$I_t(\phi_x) = - \left. \frac{\partial E_0(\phi_x, \phi_y)}{\partial \phi_y} \right|_{\phi_y=0} \quad (4.22)$$

Aucune des directions  $\vec{x}$  où  $\vec{y}$  n'étant privilégiée, l'énergie doit être symétrique par la transformation  $\phi_x \leftrightarrow \phi_y$ . Par analogie avec le calcul amenant à l'équation (4.13) ; les premières dépendances en  $\Phi_y$  de l'énergie, à l'ordre le plus bas, proviennent des chemins qui font le tour du flux vers le haut ou le bas de l'échantillon, elles entraînent donc la dépendance suivante  $I_t \propto t^{L_y} / U^{L_y-1} \sin(\Phi_y)$ . Mais ce courant est celui directement créé par un flux  $\Phi_y$ , il est nul quand on prend  $\Phi_y = 0$ .

Les dépendances, qui persistent quand on n'applique aucun flux ( $\Phi_y = 0$ ) dans la direction  $\vec{y}$ , sont induites par le flux  $\Phi_x$ . Elles sont d'ordre supérieur à  $L_y$  et proviennent des chemins qui entourent à la fois le flux en  $x$  et celui en  $y$ . On montre un exemple de chemin dans la figure (4.9). L'ordre le plus bas où apparaît ce genre de dépendance est donc l'ordre  $m = L_x + L_y$ , qui correspond à la longueur minimale d'un chemin entourant les deux flux. On a maintenant des processus qui vont vers la droite par en haut  $S_{dh}$  ou vers la gauche par en haut  $S_{gh}$  et la même chose par en bas  $S_{db}$  et  $S_{db}$ . Comme dans le cas des courants longitudinaux, les chemins de

<sup>12</sup>Les courants locaux sont définis dans le paragraphe (3.3)

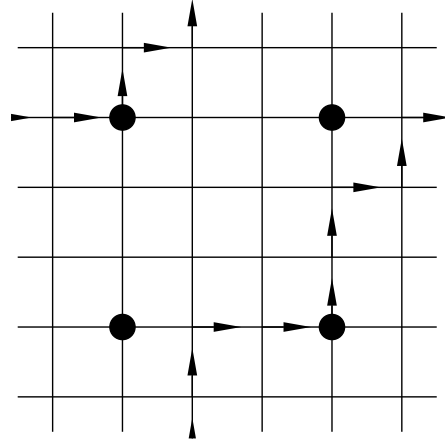


FIG. 4.9: Processus contribuant au courant transverse induit par le flux longitudinal en l'absence de flux transverse.

sens opposés se combinent car ils sont égaux à un signe près dans les flux . Ainsi la correction à l'énergie provenant des processus  $S_{dh}$  et  $S_{gb}$  donne :

$$E_{0,dh+gb}^{(m)} = -2 \frac{t^m}{U^{m-1}} \cos(\phi_x + \phi_y) \sum_{S_{dh}} \text{sign}(P_{S_{dh}}) \left[ \prod_{i=1}^{m-1} \tilde{e}_{\alpha_i} \right]^{-1} \quad (4.23)$$

tandis que celle provenant des processus  $S_{gh}$  et  $S_{db}$  est :

$$E_{0,db+gh}^{(m)} = -2 \frac{t^m}{U^{m-1}} \cos(\phi_x + \phi_y) \sum_{S_{db}} \text{sign}(P_{S_{db}}) \left[ \prod_{i=1}^{m-1} \tilde{e}_{\alpha_i} \right]^{-1} \quad (4.24)$$

En prenant alors la dérivée par rapport à  $\phi_y$  puis  $\phi_y = 0$ , on obtient le courant transverse induit par le flux  $\Phi_x$  à l'ordre le plus bas  $m = L_x + L_y$  en théorie de perturbation :

$$I_t^{(m)}(\phi_x) = 2 \frac{t^m}{U^{m-1}} \sin \phi_x \left( \sum_{S_{dh}} \text{sign}(P_{S_{dh}}) \left[ \prod_{i=1}^{m-1} \tilde{e}_{\alpha_i} \right]^{-1} - \sum_{S_{db}} \text{sign}(P_{S_{db}}) \left[ \prod_{i=1}^{m-1} \tilde{e}_{\alpha_i} \right]^{-1} \right) \quad (4.25)$$

Dans cette expression, on remarque l'utilité du désordre, car à chaque processus  $S_{dh}$  on peut associer le processus  $S_{db}$  symétrique du précédent par rapport à la ligne  $y = L_y/2$ . Ces deux processus ont des énergies  $e_{\alpha_i}$  identiques pour la partie d'interaction<sup>13</sup>. Les deux sommes s'annulent donc exactement en l'absence de désordre. L'ordre de perturbation auquel apparaît le courant transverse induit est supérieur à celui du courant longitudinal. On s'attend donc à ce que ce dernier disparaisse moins vite avec l'interaction et donc qu'il y ait un alignement des courants à forte interaction, comme cela est constaté dans les articles [14, 17]. Ainsi pour 4 particules dans  $6 \times 6$  on a  $I_l \propto t^6/U^5$  et  $I_t \propto t^{12}/U^{11}$ .

<sup>13</sup>Les  $e_{\alpha_i}$  sont identiques mais pas les  $\tilde{e}_{\alpha_i}$ .

### 4.3 Hamiltonien effectif de spin sur réseau

Jusqu'à présent, on avait considéré des fermions sans spin. On rajoute les spins dans cette section. Bulaevskii [28] a montré en 1967 que pour une énergie cinétique négligeable, au demi-remplissage toutes les quantités physiques peuvent s'exprimer en fonction d'opérateurs dans l'espace des spins. L'obtention du hamiltonien effectif de spin, dans le modèle d'Hubbard au demi remplissage, peut se faire perturbativement en  $(t/U)$  comme cela est traité dans le livre d'Auerbach [9]. On peut par analogie retrouver un modèle identique dans le cas de l'interaction Coulombienne. C'est ce que l'on explique dans ce paragraphe. Nous dérivons, dans la limite de forte interaction, le hamiltonien effectif de spin associé au problème de  $N$  particules de spin  $\frac{1}{2}$  en interaction Coulombienne dans un potentiel désordonné.

#### 4.3.1 Calcul perturbatif du hamiltonien effectif

A énergie cinétique nulle ( $H_K = 0$ ), l'état fondamental est un cristal de Wigner accroché par le désordre, qui minimise l'énergie d'interaction et le potentiel de désordre. Si on appelle  $i = i_1, i_2, \dots, i_N$  les sites occupés par le cristal, l'état fondamental est de la forme  $|\psi_0\rangle = \left(\prod_{i=i_1}^{i_N} c_{i,\sigma_i}^+\right) |\emptyset\rangle$ . Il est donc dégénéré en spin  $2^N$  fois, puisque chaque particule peut avoir  $\sigma_i = \uparrow$  ou  $\downarrow$ . Pour connaître les nouveaux états propres lorsqu'on branche perturbativement l'énergie cinétique, il faut diagonaliser la matrice effective des couplages  $M$  (voir paragraphe (4.2.1)). Cette dernière s'écrit à l'ordre  $n$  :

$$M_{\beta,\beta'}^{(n)} = \sum_{S_n} \frac{\langle \psi_0^{(\beta)} | H_K | \psi_{\alpha_1} \rangle \langle \psi_{\alpha_1} | H_K | \psi_{\alpha_2} \rangle \dots \langle \psi_{\alpha_{n-1}} | H_K | \psi_0^{(\beta')} \rangle}{(E_0 - E_{\alpha_1})(E_0 - E_{\alpha_2}) \dots (E_0 - E_{\alpha_{n-1}})} \quad (4.26)$$

avec  $\beta, \beta' = 1, 2, \dots, 2^N$  indexant les états dégénérés. On appelle  $b$  la distance entre particules dans le cristal, en unité de pas du réseau des sites  $a$ .

- Jusqu'à l'ordre  $2b - 1$ , on ne peut pas échanger par des sauts la position de deux particules. Tous les processus ramènent les particules à leur site initial. Donc à cet ordre, seuls les couplages  $\beta = \beta'$  sont non-nuls. De plus les processus  $\{S_n, n = 0, \dots, 2b - 1\}$  sont identiques quel que soit l'état  $\beta$ , la matrice est donc proportionnelle à l'identité dans le sous-espace des états  $|\psi_0^{(\beta)}\rangle$  :

$$\begin{aligned} M^{(n)} &= E^{(n)} \cdot \mathbb{I}_{2^N} \quad \forall n = 0, \dots, 2b - 1 \\ E^{(n)} &= \sum_{S_n} \frac{\langle \psi_0^{(1)} | H_K | \psi_{\alpha_1} \rangle \langle \psi_{\alpha_1} | H_K | \psi_{\alpha_2} \rangle \dots \langle \psi_{\alpha_{n-1}} | H_K | \psi_0^{(1)} \rangle}{(E_0 - E_{\alpha_1})(E_0 - E_{\alpha_2}) \dots (E_0 - E_{\alpha_{n-1}})} \end{aligned} \quad (4.27)$$

- A l'ordre  $2b$ , deux particules proches voisines et de spins opposés peuvent échanger leur position en suivant un chemin rectiligne (voir figure (4.10) en haut). En effet, sur un chemin rectiligne, les particules se croisent et se trouvent donc sur un même site  $K$ , dans un des états intermédiaires. Elles doivent donc nécessairement avoir des spins opposés, d'après le principe de Pauli. Ces processus seront notés  $S_e$ . A ces processus, on peut associer le processus identique jusqu'au croisement des particules en  $K$ , puis qui échange le rôle des particules ensuite. Ce

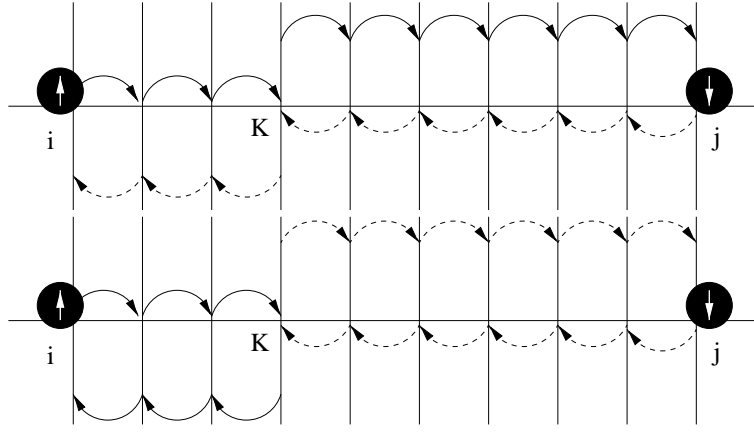


FIG. 4.10: Deux processus où les particules se croisent et donc sont de spins opposés. En haut on a un processus d'échange  $S_e$  où les particules se croisent au site  $K$ . En bas le processus sans échange  $S_{ne}$  correspondant avec les mêmes énergies pour les états intermédiaires que dans le cas précédent. Ces deux processus donnent donc lieu à des couplages identiques en valeur absolue. Les processus ( $S_e$  ou  $S_{ne}$ ) sont indépendants du spin en  $i$ . C'est pourquoi les éléments non-nuls des différentes matrices de couplage sont identiques.

dernier processus, noté  $S_{ne}$  est diagonal puisqu'il n'échange pas les particules (voir figure (4.10) en bas). Les autres processus d'ordre  $2b$ , où les particules ne se croisent pas, se traitent de la même manière que pour les ordres inférieurs : ils apportent une contribution diagonale identique pour tous les états dégénérés, notée  $E_d^{(2b)}$ .

On se restreint maintenant au sous-espace où les spins sont fixés sur tous les sites sauf deux sites proches voisins  $i$  et  $j$ . Une base de ce sous-espace est  $\{|\sigma_i, \sigma_j\rangle\} = \{|\uparrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\downarrow, \downarrow\rangle\}$ . Dans cette base, la contribution des processus  $S_{ne}$  à la matrice des couplages peut s'écrire :

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_{ne} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{ne} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \frac{M_{ne}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{M_{ne}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{M_{ne}}{2} \mathbb{I} - 2M_{ne} S_i^z S_j^z$$

où les opérateurs  $S_i$  sont définis en bas de page<sup>14</sup>. De même on peut écrire la contribution provenant des processus d'échanges  $S_e$  :

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_e & 0 \\ 0 & M_e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = M_e (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

<sup>14</sup>Si on note  $|i \uparrow\rangle = c_{i,\uparrow}^+ |0\rangle$  alors on définit les opérateurs  $S_i$  par :  $S_i^z |j \uparrow\rangle = (1/2)\delta_{ij} |j \uparrow\rangle$  ;  $S_i^z |j \downarrow\rangle = (-1/2)\delta_{ij} |j \downarrow\rangle$  ;  $S_i^x |j \uparrow\rangle = (1/2)\delta_{ij} |j \downarrow\rangle$  ;  $S_i^x |j \downarrow\rangle = (1/2)\delta_{ij} |j \uparrow\rangle$  ;  $S_i^y |j \uparrow\rangle = (i/2)\delta_{ij} |j \downarrow\rangle$  ;  $S_i^y |j \downarrow\rangle = (-i/2)\delta_{ij} |j \uparrow\rangle$  ;  $S_i^+ |j \uparrow\rangle = (S_i^x + iS_i^y) |j \uparrow\rangle = 0$  ;  $S_i^+ |j \downarrow\rangle = \delta_{ij} |j \uparrow\rangle$ .



Le signe d'un couplage  $M$ , issu d'un processus  $S$ , est donné par  $\text{sign}M = -\text{sign}(P_S)$ . Comme les processus  $S_e$  échangent deux particules,  $\text{sign}(P_{S_e}) = -1$  et donc  $\text{sign}M_e = +1$  et de même  $\text{sign}M_{ne} = -1$ . De plus comme il y a une correspondance exacte entre les processus  $S_e$  et  $S_{ne}$  : les couplages correspondant sont égaux en valeur absolue. On peut donc poser  $M_e = -M_{ne} = J/2$ . En toute rigueur, les coefficients  $M_e$  dépendent de  $i$  et  $j$ . Toutefois les processus étant identiques pour tous les couples  $(i, j)$  proches voisins, à des termes de désordre près, on pourra les considérer comme indépendants de  $(i, j)$  en première approximation. En sommant à tous les ordres jusqu'à l'ordre  $2b$ , on obtient la matrice effective à diagonaliser pour obtenir les états propres et les vecteurs propres :

$$M_{eff}^{2b} = \left( \sum_{n=0}^{2b-1} E^{(n)} + E_d^{(2b)} - \frac{J}{4} \right) \cdot \mathbb{I}_{2^N} + J \sum_{\langle i, j \rangle} \left[ S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] \quad (4.28)$$

La première partie étant proportionnelle à l'identité, seule la deuxième partie détermine les vecteurs propres. En étudiant donc le hamiltonien effectif  $H_{eff}$  formé par la deuxième partie, on obtient donc les vecteurs propres et les valeurs propres à une constante près, à l'ordre  $2b$  de la théorie de perturbation.

$$H_{eff} = J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \quad (4.29)$$

C'est le hamiltonien du modèle d'Heisenberg antiferromagnétique avec ( $J > 0$ ) et  $J \propto t^{2b}/U^{2b-1}$ .

Dans la figure (4.11) on vérifie la dépendance en  $J$  de la partie de spin du hamiltonien. Pour cela on diagonalise exactement le problème pour un petit système dans chaque sous-espace  $S_z = \sum_i S_i^z$  fixé. On appelle  $E_0(S_z)$  l'énergie minimale dans un sous-espace à  $S_z$  fixé et  $\Delta_s^0 = E_0(s) - E_0(s-1)$  la différence entre les énergies minimales de deux sous-espaces consécutifs. Les  $\Delta_s^0$  ne gardent que les dépendances en spin de l'énergie. On aura donc typiquement  $\Delta_s^0 \propto J \propto t^{2b}/U^{2b-1}$ .

### 4.3.2 Courants permanents à 1D pour un nombre pair de particules avec spin

A forte interaction, les  $N = 2p$  particules<sup>15</sup>, forment un cristal de Wigner. Avec les mêmes notations que dans le paragraphe précédent, les sites  $i = i_1, i_2, \dots, i_N$  du cristal forment un réseau bipartite<sup>16</sup> de spins couplés par un Hamiltonien effectif d'Heisenberg antiferromagnétique [9]. D'après le théorème de Marshall, le fondamental de ce système  $|\Phi_0\rangle$  est un singulet de spin total  $S = 0$ . De plus si on appelle génériquement  $\beta$  les configurations de spins à  $S_z = 0$ , on peut alors écrire le fondamental sous la forme :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\beta} f_{\beta} \prod_{i=i_1}^{i_N} \left( c_{i,\uparrow}^+ \right)^{n_{i,\uparrow}(\beta)} \prod_{i=i_1}^{i_N} \left( c_{i,\downarrow}^+ \right)^{n_{i,\downarrow}(\beta)} |0\rangle \text{ avec } \langle \hat{n}_{i_k,\uparrow} + \hat{n}_{i_k,\downarrow} \rangle = 1 \text{ et } f_{\beta} \in \mathbb{R}^{+*} \quad (4.30)$$

<sup>15</sup>  $p \in \mathbb{N}$

<sup>16</sup> car  $N$  est pair, on a donc 2 sous-réseaux de  $p$  sites.

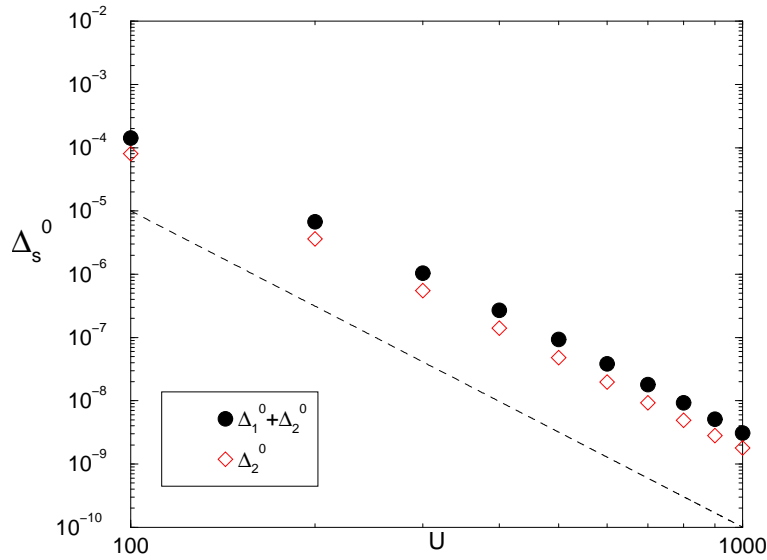


FIG. 4.11: Dépendance de  $J$  en  $U$ , pour un système de 4 particules avec spin dans un réseau  $6 \times 6$ . La distance entre particules dans le cristal vaut  $b = 3$ , on a donc  $\Delta_s^0 \propto U^{-5}$ . On a tracé en pointillé une pente (-5).

On a pris le parti d'ordonner les opérateurs suivant leurs spins puis suivant leurs positions. L'état fondamental étant  $S_z = 0$ , on a<sup>17</sup>  $N_\uparrow = N_\downarrow = p$ . Les variations d'énergie à l'ordre  $n$  sont données par l'équation (4.21), et les premières dépendances en flux apparaissent toujours à l'ordre  $n = L_x$ , puisque les chemins doivent toujours faire le tour du flux. Il existe alors trois types de processus de sauts possibles :

- Seuls les spins up font le tour dans une direction en prenant la place de leur premier voisin de même spin up<sup>18</sup>. Ce processus entraîne une permutation cyclique uniquement sur les opérateurs de spins up, donnant un signe en  $(-1)^{N_\uparrow} = (-1)^p$ .
- Identiquement, si seuls les spins down effectuent la permutation, on obtient le signe  $(-1)^{N_\downarrow} = (-1)^p$ .
- Le troisième processus consiste à faire tourner dans une direction toutes les particules vers leur premier voisin. Comme dans ce processus, seule une particule avec un spin particulier traverse le bord, on ne doit donc restituer l'ordre que sur les opérateurs ayant ce même spin, ce qui donne encore le signe  $(-1)^p$ .

D'autre part, tous les préfacteurs  $f_\beta^* f_{\beta'}$  sont réels et positifs, il n'apportent donc pas de signes supplémentaires. Le résultat obtenu est donc que le signe du courant permanent à 1D, pour un nombre  $N$  pair de particules avec spin en interaction Coulombienne forte et en milieu désordonné, est  $(-1)^{N/2}$ . Ce résultat est identique à celui du cas sans interaction [87] et à celui d'Hubbard à demi-remplissage. Il diffère par contre de celui du modèle d'Hubbard à faible remplissage et forte interaction où le courant est diamagnétique pour un nombre pair

<sup>17</sup>  $N_\uparrow = \sum_{i=1}^N \langle \hat{n}_{i,\uparrow} \rangle$  et  $N_\downarrow = N - N_\uparrow$

<sup>18</sup> Au cours d'un tel chemin, un spin up croise éventuellement plusieurs spins downs avant d'arriver à son premier voisin de même spin

de particules [73, 161].

## 4.4 Limites thermodynamique et continue

### Longueur de localisation pour le cristal de Wigner

L'expression (4.13) qui donne le courant permanent, montre que celui-ci décroît lorsque la taille du système augmente et que donc ultimement ce dernier est isolant. Si on associe une longueur de localisation  $\xi$  au cristal, on s'attend à ce que le courant se comporte aux grandes tailles en :

$$I(L_x) \propto \exp(-L_x/\xi) \quad (4.31)$$

On peut alors déduire de l'équation (4.13) l'expression de la longueur de localisation :

$$\xi = \left( \ln \left( \frac{U}{t} \right) \right)^{-1} \quad (4.32)$$

On obtient pour la longueur de localisation le même comportement en  $U$  que celui constaté dans le cas de l'isolant de Mott pour le modèle d'Hubbard à forte interaction [140].

### Défauts du cristal

Dans la limite thermodynamique avec désordre, le cristal de Wigner n'est pas ordonné sur toute la taille du système, mais se décompose en domaines . En effet des défauts<sup>19</sup> apparaissent permettant un gain en énergie potentielle de désordre de plus en plus important quand la taille du cristal augmente ; aussi ce dernier se brise en domaines ordonnés, les défauts se trouvant en bord de domaines. Dans ce cas, on ne peut plus appliquer la théorie développée dans ce chapitre pour le calcul du courant. Toutefois on peut estimer, par des arguments similaires à ceux expliqués dans les articles [69, 79, 88], le rapport critique  $(\frac{U}{W})_c$  au dessus duquel la théorie s'applique. Nous allons ici détailler le calcul dans le cas d'un défaut de type paire interstitiel-trou (i-t), le calcul étant du même type pour les autres types de défauts. Dans le cas d'un défaut de type paire interstitiel-trou, on suppose qu'une des charges du cristal est déplacée d'un pas du réseau  $a$  dans une direction quelconque. On peut alors estimer le gain en énergie potentielle de désordre qui est de l'ordre de  $\Delta E_{\text{dsordre}}^{i-t} \approx W$ , par contre ce défaut a un coût en énergie d'interaction qu'on peut estimer par  $\Delta E_{\text{interaction}}^{i-t} \approx \frac{Ua^2}{b^3}$ . Le cristal sera donc instable dès que  $\Delta E_{\text{dsordre}}^{i-t} + \Delta E_{\text{interaction}}^{i-t} < 0$ . La densité de charge étant  $\nu = 1/b^2$ , on en déduit le domaine de paramètre pour lequel la théorie résiste aux défauts (i-t) :

$$\frac{U}{W} > \left( \frac{U}{W} \right)_c^{i-t} \approx \frac{1}{a^2 \nu^{3/2}} \quad (4.33)$$

---

<sup>19</sup>Les défauts sont des interstitiels, des trous ou encore des dislocations.

### Limite continue

On s'intéresse ici aux limitations de la théorie lorsque l'on étudie la limite continue où  $L$  tendant vers l'infini et  $a$  (le pas du réseau) tendant vers zéro à taille constante  $aL = \mathcal{L}$ . Dans la théorie de perturbation sur réseau, les chemins sont en pas entier du réseau, on obtient donc un développement en série en puissance de  $(t/U)$ . Or on a vu dans le chapitre (3) que le rapport  $r_s \propto (U/t)$ . On peut donc écrire génériquement que le développement de l'énergie du fondamental est de la forme :

$$E_0 \approx \sum_{n \in \mathbb{N}} A_n r_s^{-n} \quad (4.34)$$

Ce développement est différent de celui obtenu en continue par Carr [30], où l'on trouve :

$$E_0 = \frac{f_0}{r_s} + \frac{f_1}{r_s^{\frac{3}{2}}} + \frac{f_2}{r_s^2} + O[r_s^{-\frac{5}{2}}] \text{ pour } r_s \gg 1 \quad (4.35)$$

Les termes en  $\sqrt{r_s}$  proviennent dans le développement de Carr des fluctuations locales qui donnent des vibrations harmoniques des positions. Dans notre modèle, on ne peut obtenir ces fluctuations quand elles sont plus petites que le pas du réseau (qui est la longueur minimale que l'on peut prendre en compte). La théorie de perturbation est donc fortement dépendante du réseau et diffère de la théorie continue à très forte interaction.

## 4.5 Conclusion

En conclusion de ce chapitre nous résumons la démarche et les principaux résultats obtenus :

- Nous avons présenté de manière systématique, dans le cadre d'un modèle sur réseau bidimensionnel, un traitement du courant permanent dans la limite de forte interaction Coulombienne. Dans ce cas, les charges électroniques forment un cristal de Wigner adapté au réseau, et les contributions dominantes sont données par les suites d'états faisant le tour du flux en  $(t^{L_x}/U^{L_x-1})$ .
- Nous avons obtenu dans le cas sans spin, une règle donnant le signe du courant. Cette règle ne dépend que de la structure du cristal et peut-être vue comme un prolongement bidimensionnel du théorème de Legett. De plus cette règle ne dépend pas de la réalisation du désordre à forte interaction.
- Nous avons obtenu que le premier effet du désordre est de diminuer l'amplitude du courant la correction étant proportionnelle à  $(W/U)$ . Pour un désordre trop fort, la structure du cristal est perdue et la théorie n'est plus valable.
- Nous avons obtenu la dépendance du courant transverse en flux dont la contribution dominante est proportionnelle à  $(t^{L_x+L_y}/U^{L_x+L_y-1})$ . Cette décroissance étant plus rapide que celle du courant longitudinal seul ce dernier subsiste à très forte interaction. On a donc un alignement des courants lorsque l'on augmente l'interaction comme cela est constaté dans des études numériques [14–16, 18].

- Nous avons retrouvé l'expression du couplage d'échange  $J \propto (t^{2b}/U^{2b-1})$  du hamiltonien effectif d'Heisenberg dans la limite de forte interaction.



# Chapitre 5

## Etude numérique sur réseau de fermions avec spins

---

Le cas des fermions sans spin avait montré l'existence d'un régime particulier de l'état fondamental, pour des valeurs intermédiaires de  $r_s$  [14] qui correspondent à celles constatées expérimentalement pour la transition Isolant-Métal. Toutefois les faits expérimentaux comme les études théoriques soulignent la contribution des degrés de liberté de spin à la création de l'état métallique :

- L'étude en champ magnétique parallèle, qui n'agit que sur les spins, montre une disparition de la phase métallique [95].
  - Une étude du groupe de renormalisation suggère une phase métallique dépendant du spin [52].
- L'étude de la contribution des degrés de liberté de spin à la conduction du système est donc abordée dans ce chapitre. On mettra en évidence un régime intermédiaire où l'on a une compétition entre le ferromagnétisme de Stoner, de la limite d'interaction faible, et l'antiferromagnétisme de super-échange de la limite du cristal de Wigner.

### 5.1 Les électrons sur un réseau bidimensionnel

Pour avoir accès au comportement des électrons, à des valeurs de  $r_s$  inaccessibles par théorie de perturbations, on étudie comme précédemment des petits systèmes d'électrons sur réseau. L'ajout des degrés de liberté de spin amène à une augmentation considérable de l'espace de Hilbert et de Fock. On va donc utiliser les symétries du problème pour réduire au maximum les dimensions de l'espace. L'espace de Fock (ensemble des états antisymétriques) pour un système de  $N$  électrons dans un réseau  $L \times L$  est de dimension  $N_{Ft} = C_{2L^2}^N$ . Cela correspond à des dimensions de l'espace de l'ordre de  $10^6$  pour un système de 4 particules sur 36 sites, ce qui est la limite pour la diagonalisation exacte numérique. Bien qu'étant intéressé par le comportement des systèmes sous champ magnétique dans le plan du gaz 2D, on étudiera les systèmes sans champ. On déduira ensuite de cette étude les propriétés avec champ. Dans tout

le chapitre, on fixe l'amplitude du désordre à  $W = 5$ , ce qui nous permettra de comparer nos résultats avec les études numériques sans spin [14]. L'effet de l'amplitude du désordre sur l'aimantation a été étudié par Benenti *et al* [13].

### 5.1.1 Hamiltonien des particules avec spins et sans champ magnétique

En l'absence de champ magnétique, la symétrie de spin est conservée et toutes les directions de l'espace sont équivalentes. On a alors les relations de commutations pour le hamiltonien  $H$  :

$$[H, S^2] = [H, S_z] = 0 \quad (5.1)$$

où  $\vec{z}$  une direction arbitraire de l'espace et  $S_z$  la projection de l'opérateur de spin suivant cette direction. Le hamiltonien est donc diagonal par bloc dans une base propre de l'opérateur  $S_z$ . On se restreindra donc à la diagonalisation dans chaque sous-espace propre de  $S_z$ , dont la dimension est plus petite. On rappelle que  $N_\uparrow$  le nombre d'électrons avec un spin "up" et  $N_\downarrow$  le nombre d'électrons avec un spin "down". On a les relations suivantes :

$$\begin{aligned} N &= N_\uparrow + N_\downarrow \\ S_z &= \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{2} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Avec ces notations, les sous-espaces à  $S_z$  fixés ont une dimension

$$N_F(S_z) = C_{L^2}^{N_+} C_{L^2}^{N_-} \quad (5.3)$$

A titre de comparaison, le tableau suivant montre le gain en taille de matrices pour différents cas.

|          | (N,L)  |           |            |
|----------|--------|-----------|------------|
|          | (4,4)  | (4,6)     | (4,8)      |
| $N_{Ft}$ | 35 960 | 1 028 790 | 10 668 000 |
| $N_F(0)$ | 14 400 | 396 900   | 4 064 256  |
| $N_F(1)$ | 8 960  | 257 040   | 2 666 496  |
| $N_F(2)$ | 1 820  | 58 905    | 635 376    |

Il est à noter que chaque sous-espace ( $S = \text{constante}$ ) possède une projection sur  $S_z = 0$  pour  $N$  pair et  $S_z = 1/2$  pour  $N$  impair. L'état ayant l'énergie la plus basse, dans le sous-espace de plus petit  $S_z$ , est donc aussi le fondamental du système sans champ magnétique. Les autres sous-espaces sont aussi étudiés pour pouvoir retrouver le comportement du système sous champ magnétique parallèle. On classe les énergies suivant leurs nombres quantiques de spins et on les notera  $E(S^2, S_z)$ . Comme le montre la figure (5.1), qui décrit la structure diagonale par bloc de la matrice hamiltonienne, on a  $N + 1$  blocs qui sont les sous-espaces propres de l'opérateur  $S_z$  de valeurs propres respectives  $-N/2, \dots, N/2$ . En l'absence de champ magnétique  $\vec{B}$ , le système est invariant par rotation dans l'espace de spin et il n'y a donc pas de



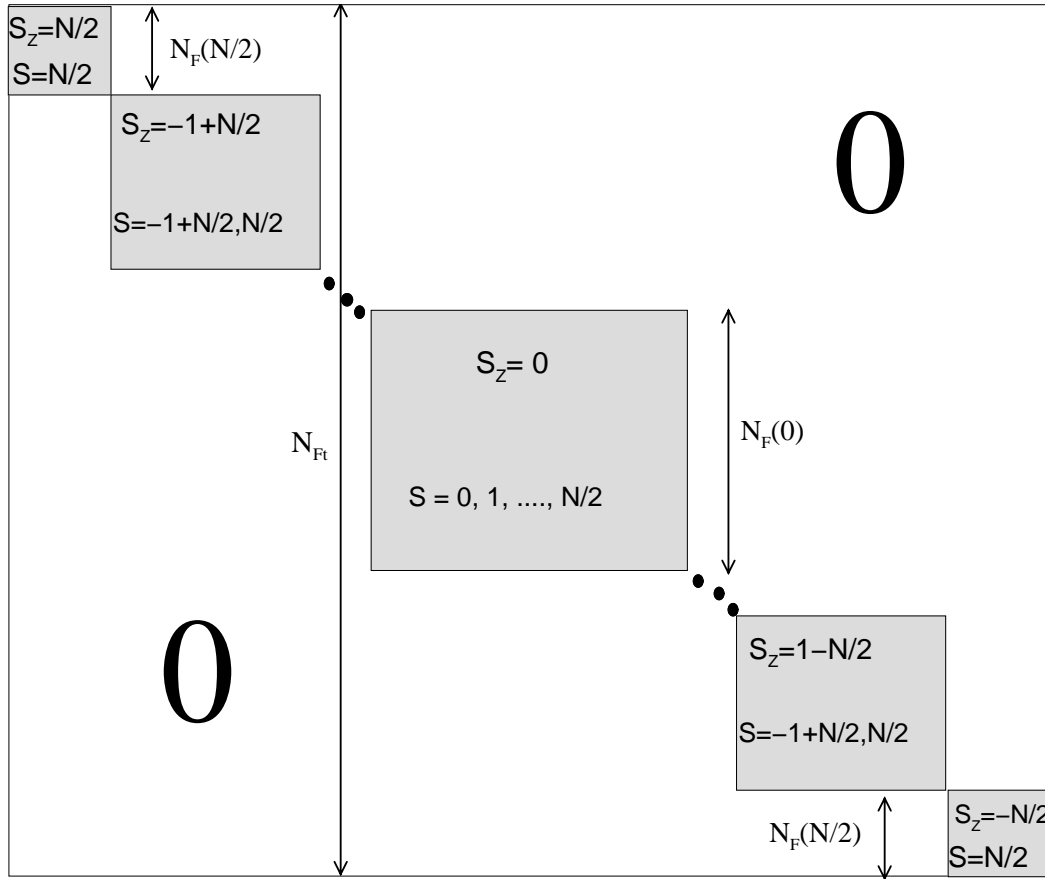


FIG. 5.1: Structure de la matrice hamiltonienne pour  $N$  particules ( $N$  pair) identiques de spin  $\frac{1}{2}$ . On a  $N + 1$  blocs diagonaux à  $S_z$  fixé ( $S_z = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}$ ). La taille des blocs diagonaux à  $S_z$  fixé est  $N_F(S_z)$  et la taille totale de la matrice est  $N_{Ft}$ .

direction  $\vec{z}$  privilégiée<sup>1</sup>. L'énergie du fondamental ne dépend donc pas du nombre quantique  $S_z$  mais uniquement de  $S^2$ . Ainsi si le spin total du fondamental est  $S$ , les  $2S + 1$  blocs vérifiant  $S \geq S_z \geq -S$  auront une énergie minimale  $E_0(S^2, S_z)$  identique. Le fondamental est donc dégénéré  $2S + 1$  fois. En comptant le nombre  $N_b$  de sous-bloc ayant la même énergie minimale, on déduira le spin du fondamental par  $S = (N_b - 1)/2$ . On note  $E_0(S_z)$  l'énergie minimale dans chaque sous-bloc sans champ.

### 5.1.2 Effet d'un champ magnétique parallèle

Un champ magnétique  $\vec{B}$  parallèle définit une direction privilégiée  $\vec{z}$ . Il lève donc la dégénérescence en  $S_z$  en rajoutant au hamiltonien sans champ le terme Zeeman  $-g\mu BS_z$ . Par rapport au cas sans champ, on rajoute donc dans chaque sous-bloc un terme proportionnel à la matrice identité restreinte au sous-bloc. Ceci ne change pas les vecteurs propres et dé-

<sup>1</sup> Cela implique donc que le sous-bloc  $S_z = x$  est identique au sous-espace  $S_z = -x$ .

cale globalement les énergies par la valeur du terme de Zeeman dans le sous-espace considéré. Donc si l'on note  $E'_0$  les énergies avec champ, on aura  $E'_0(S_z) = E_0(S_z) - g\mu B S_z$ . Le minimum sur les  $S_z$  de  $E'_0(S_z)$  donne l'énergie fondamentale du système avec champ. On obtient aussi l'aimantation puisque  $S = S_z^{min}$ , où  $S_z^{min}$  est la valeur de  $S_z$  réalisant le minimum de  $E'_0(S_z)$ .

## 5.2 Etude numérique de 4 fermions de spin 1/2 dans un réseau $6 \times 6$

Des études précédentes pour des fermions sans spin [14, 15] ont mis en évidence un régime intermédiaire entre le verre de Fermi à faible  $r_s$  et le cristal de Wigner à fort  $r_s$ , qui correspondrait expérimentalement à la phase métallique observée dans les gaz bidimensionnels [75]. Des expériences sur ces mêmes gaz en champ magnétique parallèle<sup>2</sup> ont montré des comportements particuliers des champs de polarisation et un déplacement des seuils de transition Isolant-Métal [95, 159] (voir chapitre 2). Comme un champ parallèle n'agit que par effet Zeeman, il est nécessaire d'étudier des fermions avec leur spin.

Pour un système de 4 particules, à  $r_s = 0$  et sans champ magnétique, les électrons se rangent par paires dans les deux premiers états à une particule. On a alors  $S = 0$ . En champ magnétique, la valeur  $B^*$  du champ pour laquelle on a  $E_0(S_z) - g\mu B^* S_z = E_0(S_z = 0)$ , définit le champ nécessaire pour aimanter le système à une valeur  $S$  au moins égale à  $S_z$ . Il est donc intéressant d'étudier les énergies de polarisation :

$$\Delta_1 = E_0(S_z = 1) - E_0(S_z = 0) \text{ et } \Delta_2 = E_0(S_z = 2) - E_0(S_z = 0) , \quad (5.4)$$

qui sont les énergies Zeeman nécessaires à l'obtention des aimantations  $S = 1$  et  $S = 2$  à partir d'un échantillon non-aimanté.

### 5.2.1 Energies de polarisation : $\Delta_1$ ; $\Delta_2$

L'étude des énergies de polarisation avec l'interaction est intéressante puisqu'elle donne aussi l'évolution des champs de polarisation, qui sont des quantités mesurables expérimentalement. La valeur des énergies de polarisation varie selon la réalisation du désordre dans un échantillon. Nous allons donc commencer par étudier la distribution de ces énergies.

#### Distribution de $\Delta_1$ ; $\Delta_2$

On distingue plusieurs régimes :

A  $r_s = 0$ , les 4 particules sont rangées par paires dans les niveaux à une-particule. La première excitation en spin<sup>3</sup> consiste à mettre une des particules au niveau de Fermi dans un état plus élevé (voir figure (1.10)). L'énergie de polarisation est donc égale à l'espacement de niveaux des états consécutifs à une particule. Or on sait que la distribution des espacements de niveaux dans le régime diffusif est donnée par la distribution de Wigner-Dyson. Pour  $\Delta_1$ , à interaction

---

<sup>2</sup>Dans le plan du gaz bidimensionnel

<sup>3</sup>qui consiste en un passage de l'état  $S = 0$  à l'état  $S = 1$

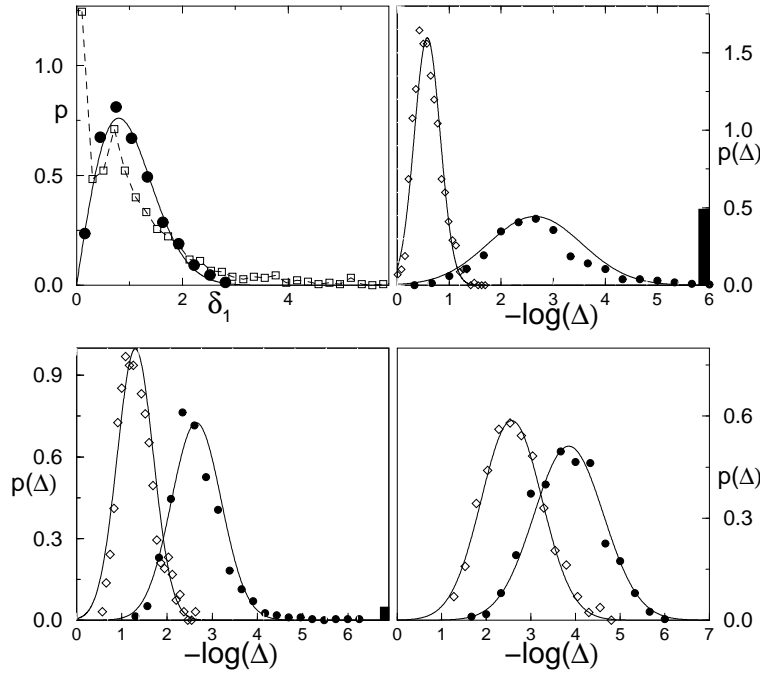


FIG. 5.2: Distributions de  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  pour différentes valeurs de  $r_s$ . En haut à gauche :  $p(\Delta_1 / < \Delta_1 >)$  à  $r_s = 0$  (cercles) et  $r_s = 2.5$  (carrés). La ligne continue est la distribution de Wigner. Dans les trois autres figures on trace  $p(-\log \Delta_1)$  (cercles) et  $p(-\log \Delta_2)$  (diamants) à différents  $r_s$ . En haut à droite :  $r_s = 2.5$ . En bas à gauche :  $r_s = 5.8$ . En bas à droite  $r_s = 16.8$ . Les barres épaisses, sur le coté droit des figures, donnent l'amplitude du pic  $\delta(\Delta_1)$  de la distribution bimodale  $p(\Delta_1)$ . Les lignes continues sont des interpolations gaussiennes.

nulle, on aura  $P(s = \Delta_1 / \langle \Delta_1 \rangle) = (\pi s / 2) \exp[-(\pi s^2 / 4)]$ . De même  $\Delta_2$  sera distribuée comme la somme de deux excitations à une-particule.

A  $r_s = \infty$ , les quatre particules forment un cristal accroché par le désordre sur les sites  $\{i_j\}$  minimisant l'énergie ( $\sum_{j=1}^4 v_{i_j}$ ). Le fondamental est donc de la forme  $|\Psi_0\rangle = \prod_{j=1}^4 c_{i_j, \sigma_j}^\dagger |0\rangle$  et est  $2^4$  fois dégénérés en spin. A une interaction forte mais finie, on obtient, en théorie de perturbation, un hamiltonien effectif de spin qui est un modèle d'Heisenberg antiferromagnétique (voir paragraphe (4.3)). C'est alors le couplage  $J$  qui détermine l'amplitude des énergies de polarisation :

$$\Delta_i \propto J \propto t(t/U)^{2b-1} \left[ \prod_{i=1}^{2b-1} \tilde{\epsilon}_{\alpha_i} \right]^{-1} ; \text{ avec } i = 1, 2 \quad (5.5)$$

Dans le cas des simulations numériques effectuées, le réseau est carré ce qui conduit à un cristal carré de coté  $b = 3$ . Les dépendances en  $U$  des  $\Delta_i$  ont été vérifiées dans la figure (4.11). Le cristal étant carré le réseau de spin sur le cristal est bipartite et le modèle d'Heisenberg a un fondamental de spin  $S = 0$ , par le théorème de Marshall [9]. Les énergies  $\Delta_i$  dépendent du

désordre par le terme  $\left[\prod_{i=1}^{2b-1} \tilde{\epsilon}_{\alpha_i}\right]^{-1}$  où les termes  $\tilde{\epsilon}_{\alpha_i}$  contiennent une somme<sup>4</sup> de variables aléatoires  $v_i$  (voir paragraphe (4.1.2)). On s'attend donc à ce que chaque terme  $\tilde{\epsilon}_{\alpha_i}$ , comme somme de variables aléatoires, soit distribué normalement et que le produit des  $\tilde{\epsilon}_{\alpha_i}$  soit distribué de manière log-normale.

La figure (5.2) nous montre qu'à  $r_s = 0$ , la distribution de  $\Delta_1$  est donnée par Wigner-Dyson. Mais l'interaction conduit à une distribution bimodale avec un pic en ( $\Delta_1 = 0$ ) et une distribution (en dehors de ce pic) qui tend vers une distribution log-normale quand on augmente le facteur  $r_s$ . Le pic en ( $\Delta_1 = 0$ ) provient des échantillons spontanément aimantés car le désordre favorise le mécanisme de Stoner d'aimantation spontanée (voir paragraphe (1.4.1)). Dans certains échantillons on obtient donc sans champ magnétique  $E_0(1) = E_0(0)$ . La distribution de  $\Delta_2$  n'est pas bimodale, aucun échantillon avec un spin  $S = 2$  n'a été observé. La distribution de  $\Delta_2$  tend aussi vers une log-normale à grand  $r_s$ .

Les distributions des énergies de polarisation étant log-normales, on étudie la moyenne sur les échantillons du logarithme des énergies de polarisation  $\langle \log \Delta_1 \rangle$  et  $\langle \log \Delta_2 \rangle$ , sans prendre en compte les échantillons aimantés. La figure (5.3) montre une signature magétique

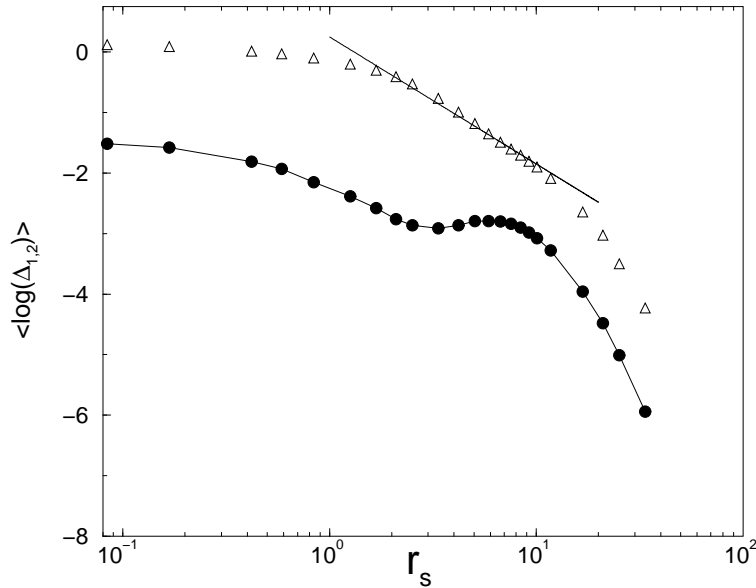


FIG. 5.3: Energies moyennes de polarisation partielle  $\langle \log \Delta_1 \rangle$  (cercles) et totale  $\langle \log \Delta_2 \rangle$  (triangles) nécessaires pour polariser des échantillons non-aimantés à  $S = 1$  et  $S = 2$ . La droite correspond à  $0.25 - 2 \log r_s$ .

confirmant l'existence d'une phase intermédiaire dans ces échantillons de petites tailles. En effet, pour  $2 \lesssim r_s \lesssim 9$ ,  $\langle \log \Delta_1 \rangle$  ne varie presque plus avec l'interaction  $r_s$  et  $\langle \log \Delta_2 \rangle$  varie en  $-2 \log r_s$ . Cette dépendance  $\Delta_2 \propto r_s^{-2}$  de l'énergie de polarisation totale est cohérente

<sup>4</sup>cette somme est constitué de la somme des quatre potentiels aléatoires des sites formant l'état fondamental auquel on retranche les quatre potentiels aléatoires des sites formant l'état excité. On a donc une somme de huit(=  $2N$ ) variables aléatoire distribué uniformément dans la boîte  $[-W/2; W/2]$ .

avec la dépendance expérimentale [126] du champ de saturation<sup>5</sup> $B_{exp}^* \propto n_e$ .

### 5.2.2 Magnétisme spontané

Par la présence du pic  $\delta(\Delta_1)$ , la distribution bimodale de  $\Delta_1$  indique qu'une partie des échantillons sont spontanément aimantés. L'étude des distributions dans la figure (5.2) montre que l'amplitude de ce pic, symbolisé par les barres noires à droite des figures en échelle logarithmique, s'annule à forte interaction. L'amplitude de ce pic, nous donne la fraction  $M$

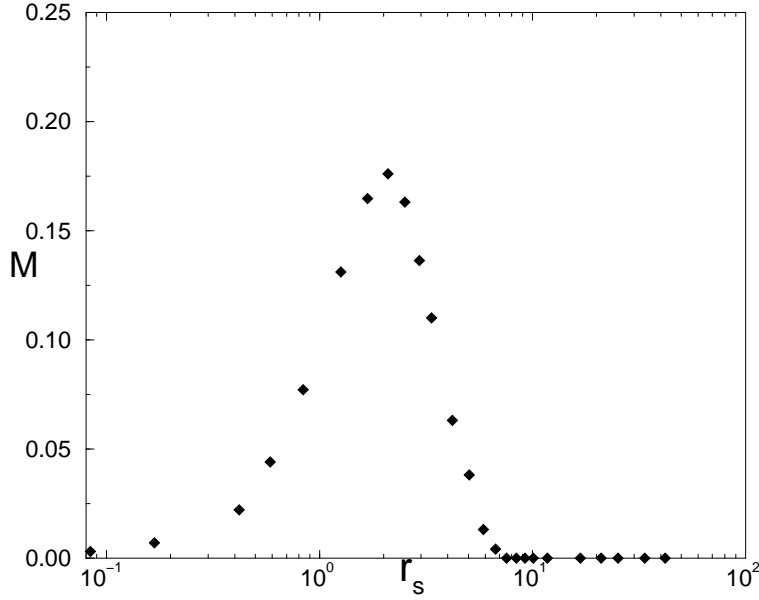


FIG. 5.4: Fraction moyenne, en fonction de  $r_s$ , d'échantillons aimantés à  $S = 1$  et  $B = 0$ . Pour environ  $\sim 1000$  échantillons étudiés.

d'échantillons spontanément aimantés à  $B = 0$ . Nous l'avons tracée en fonction du paramètre  $r_s$  dans la figure (5.4). Le comportement de  $M$  met aussi en évidence l'existence de trois régimes que nous décrivons dans ce qui suit. Remarquablement la courbe de magnétisme est très similaire aux mesures expérimentales de Reznikov *et al* [115].

#### $r_s \leq r_s^{fs}$ : Instabilité de Stoner

Au dessus d'un seuil critique de Stoner  $U_c$ , un système de fermions en interaction s'aimante spontanément (voir paragraphe (1.4.1)). Le désordre a pour effet de déplacer ce seuil. Dans certains échantillons il abaisse ce seuil et dans d'autres il l'augmente. L'effet du désordre est donc de lisser l'augmentation d'aimantation : au lieu d'avoir un brusque saut en aimantation à  $r_s^c$ , on a une apparition progressive des échantillons aimantés lorsque l'on augmente  $r_s$  depuis zéro. On a ensuite une accélération de l'augmentation au niveau de  $r_s^c \approx 0.35$ .

<sup>5</sup>Qui est le champ de polarisation total du système

Dans cette théorie de champ moyen, pour une interaction suffisamment forte tous les échantillons doivent être aimantés. Toutefois on observe (figure (5.4)) que l'augmentation du nombre d'échantillons aimantés s'arrête à  $r_s^{fs} \approx 2.2$ . C'est donc le seuil où une approche de champ moyen cesse d'être valable et où l'on change de régime.

### $r_s^{ws} \leq r_s$ : cristallisation

A  $r_s$  grand, on sait que le système cristallise et forme une molécule carré antiferromagnétique qui a pour spin total  $S = 0$ . C'est ce qu'on observe (figure (5.4)) pour la valeur de l'interaction  $r_s^{ws} \approx 9$ , qui détermine donc le seuil de cristallisation dans notre système.

### $r_s^{fs} \leq r_s \leq r_s^{ws}$ : régime intermédiaire

Entre les deux premiers régimes se trouve un régime intermédiaire où il y a une compétition entre le ferromagnétisme de Stoner et l'antiferromagnétisme du cristal de Wigner. Le changement de structure du fondamental, qui passe d'un liquide de Fermi désordonné à un solide désordonné, se ressent donc aussi sur les propriétés magnétiques du système. Ce régime correspond aussi au régime intermédiaire vu en observant les énergies de polarisation dans la figure (5.3).

## 5.2.3 Evolution de la délocalisation sous champ magnétique

Nous étudions dans ce paragraphe la fonction d'onde de l'état d'énergie minimale  $|\Psi_0(S_z)\rangle$  dans chaque sous-espace  $S_z$  à l'aide de trois caractéristiques. Il est à noter que l'état d'énergie minimale dans le sous-espace  $S_z = 0$  est l'état fondamental sans champ magnétique. Lorsque l'on branche un champ parallèle  $B$ , l'état fondamental passe dans le sous-espace  $S_z = 1$  dès que  $g\mu B = \Delta_1$  puis dans le sous-espace  $S_z = 2$  dès que  $2g\mu B = \Delta_2$ . Nous étudierons tout d'abord l'étendue spatiale des états  $|\Psi_0(S_z)\rangle$  mesurée par le nombre<sup>6</sup>  $\xi(S_z)$  de sites du réseau qu'ils occupent. Puis nous étudierons leurs structures à l'aide du paramètre<sup>7</sup>  $\gamma(S_z)$  où  $\gamma = 0$  si l'état est liquide et  $\gamma = 1$  si l'état est solide. Enfin, on étudiera les courants permanents longitudinaux et transverses induits par un flux  $\phi_x = \pi/2$  dans la direction longitudinale. Toutes ces quantités sont définies au chapitre (3)

### $\xi$ : délocalisation spatiale et magnétorésistance

Le nombre de sites occupés par les différents états varie avec la force des interactions  $r_s$ . A  $r_s$  très fort on a cristallisation quel que soit l'état de spin. Aussi chaque particule va occuper un site et donc  $\xi$  tend vers le nombre total de particules (soit 4 dans notre cas). Dans la figure (5.5) on trace  $\xi$  en fonction de  $r_s$  pour un échantillon typique (figure(a)), puis la moyenne sur tous les échantillons (figure(b)). On observe à faible  $r_s$  une délocalisation dans les sous-espaces  $S_z = 0, 1$ . Cet effet n'existe pas en moyenne dans le sous-espace  $S_z = 2$ . Ceci montre qu'à des  $r_s$  intermédiaires, on a besoin des degrés de liberté de spins pour avoir l'effet de

<sup>6</sup>  $\xi(S_z) = N^2 (\sum_i \rho_i^2(S_z))^{-1}$  avec  $\rho_i(S_z) = \langle \Psi_0(S_z) | \sum_\sigma n_{i,\sigma} | \Psi_0(S_z) \rangle$ .

<sup>7</sup>  $\gamma(S_z) = \max_r C(r, S_z) - \min_r C(r, S_z)$  où  $C(r, S_z) = N^{-1} \sum_i \rho_i(S_z) \rho_{i+r}(S_z)$

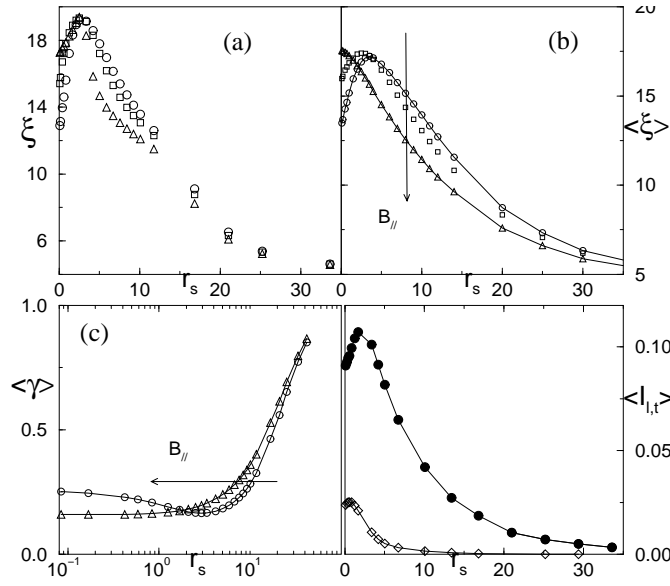


FIG. 5.5: Dans les différentes figures on trace en fonction de  $r_s$  différentes quantités mesurées pour les états d'énergies minimales dans les sous-espaces  $S_z = 0$  (cercles),  $S_z = 1$  (carrés) and  $S_z = 2$  (triangles). En haut à gauche : nombre de sites occupés  $\xi(S_z)$  pour un échantillon typique. En haut à droite : moyenne sur le désordre de  $\langle \xi(S_z) \rangle$ . En bas à gauche : moyenne du paramètre de cristallisation  $\langle \gamma(S_z) \rangle$ . En bas à droite : courant permanent moyen longitudinal  $\langle I_l(S_z = 0) \rangle$  (cercles) et transverse (diamants)  $\langle I_t(S_z = 0) \rangle$ .

délocalisation spatiale induite par l'interaction. On peut expliquer la délocalisation par le fait que dans les deux premiers sous-espaces ( $S_z = 0; 1$ ), les fonctions d'onde des particules de spins opposés peuvent avoir un recouvrement spatial alors que dans le dernier sous-espace ( $S_z = 2$ ), le principe d'exclusion de Pauli l'empêche. Dans la figure (b), la flèche souligne l'effet d'un champ magnétique parallèle dans le régime intermédiaire : on a une diminution de l'étendue spatiale des fonctions d'onde. Les propriétés de transports sont en partie reliées à l'étendue des fonctions d'onde. La diminution de l'étendue spatiale est donc cohérente avec la grande magnéto-résistance observée à des  $r_s$  intermédiaires dans les gaz bidimensionnels [45, 95].

### $\gamma$ : cristallisation et évolution du seuil sous champ

On a tracé dans la figure (5.5)(c) l'évolution du paramètre de cristallisation  $\gamma$ . On observe dans le sous-espace  $S_z = 2$ , que la cristallisation, qui correspond à l'augmentation brusque de  $\gamma$ , arrive à des interactions plus faibles que pour le sous-espace  $S_z = 0$ . La flèche met en évidence que l'interaction critique  $r_s^W$  caractéristique de la transition diminue en présence d'un champ magnétique. C'est ce qui est observé dans les gaz bidimensionnels, puisque la densité critique de la transition augmente ( $r_s \propto (n_e)^{-1/2}$ ) en présence d'un champ [127].

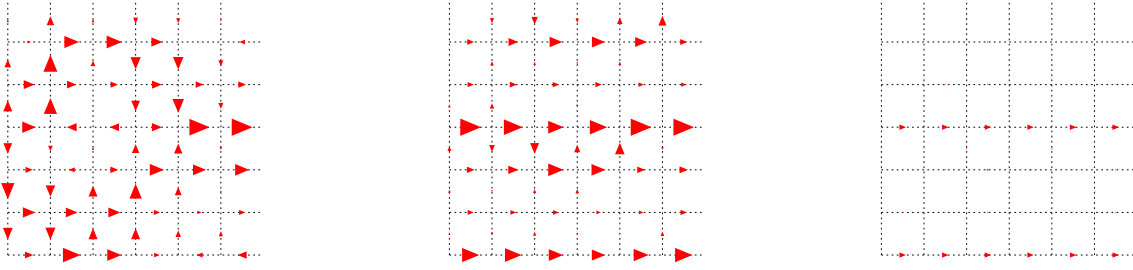


FIG. 5.6: Courants locaux dans un échantillon pour différentes forces des interactions pour 4 particules avec spins dans le sous-espace  $S_z = 0$ .

### ***I* : Trois régimes en courants**

L'étude du courant, dans la figure (5.5)(c), montre que l'introduction des degrés de liberté de spins ne change pas le fait qu'on ait, en augmentant l'interaction, un alignement des courants suivant la direction longitudinale [15]. On constate que le courant transverse s'annule plus vite que le courant longitudinal, ce que l'on voit bien sur les courants locaux de la figure (5.6). On a donc pour des fermions avec spins les mêmes conclusions que pour des fermions sans spins [14] : le comportement du courant permanent est une signature de l'existence d'un régime intermédiaire. Et de même une interpolation des courbes de courants par des exponentielles décroissantes du type

$$I_l \propto \exp(-r_s/r_s^{ws}) \text{ et } I_t \propto \exp(-r_s/r_s^{fs}) \quad (5.6)$$

donne un bon résultat.

## **5.3 Conclusions**

En conclusion de ce chapitre, on reprend les différents points abordés :

- Notre étude suggère que la prise en compte de l'interaction Coulombienne à longue portée est suffisante pour induire une délocalisation spatiale des électrons compatible avec le comportement métallique des expériences sur des gaz bidimensionnels.
  - De plus elle permet aussi de reproduire les signatures magnétiques de la transition qui sont : la magnétorésistance, le déplacement du seuil critique de transition et l'évolution du magnétisme de spin des échantillons.
  - La signature de l'existence de trois régimes est constatée sur trois types de quantités différentes : les énergies de polarisation, le magnétisme spontané et la délocalisation des états.
- Toutefois on ne peut savoir dans quelle mesure ces effets, que l'on observe sur des échantillons de petites tailles, persistent à la limite thermodynamique.



# Chapitre 6

## Etude de la cristallisation dans un système de petite taille

---

On cherche à comprendre, dans ce chapitre, la structure de la phase intermédiaire qui se trouve entre le verre de Fermi et le cristal de Wigner désordonné. L'effet principal de l'augmentation des interactions est de réorganiser la distribution de charges. Dès que la distance entre électrons est grande (près de la transition cristalline), les degrés de liberté de spin jouent a priori un rôle mineur dans la réorganisation de charges. On se restreint donc, dans ce chapitre, à une étude de fermions sans spins. Considérer des fermions sans spin est équivalent à se restreindre au sous-espace à  $S_Z$  maximal (=  $N/2$ ), où tous les fermions sont polarisés. Des études précédentes ont montré que l'on peut voir la signature d'un régime intermédiaire sur des systèmes de fermions sans spins [14, 15]. Ces études ont aussi déterminé les seuils  $r_s^f$  et  $r_s^w$  délimitant ce régime intermédiaire. On considérera ici 4 fermions dans un réseau carré  $6 \times 6$ , ce qui nous donne une dimension de l'espace  $N_F(2) = 58905$ . On étudie tout d'abord les propriétés spectrales du système qui permettent de repérer les transitions et ainsi de définir aussi les différents régimes (Fermi, Wigner, intermédiaire). On étudie ensuite la structure du fondamental, pour voir si son comportement est de type 'liquide-solide' dans le régime intermédiaire.

### 6.1 Signature spectrale d'une transition pour des fermions sans spin

#### 6.1.1 Limite du régime de Fermi $r_s^f$

**Limite de validité de la distribution de Wigner-Dyson pour la première excitation :**

On montre ici que l'on peut repérer les transitions sur les propriétés spectrales du système. Pour cela on étudie l'énergie de première excitation  $\Delta E = E_1 - E_0$  avec  $E_0$  l'énergie du fondamental et  $E_1$  celle du premier état excité. On commence par étudier la distribution  $P(s)$

de cette excitation ( $s = \Delta E / \langle \Delta E \rangle$ ) en fonction de  $r_s$ , où  $\langle \rangle$  dénote une moyenne sur le désordre.

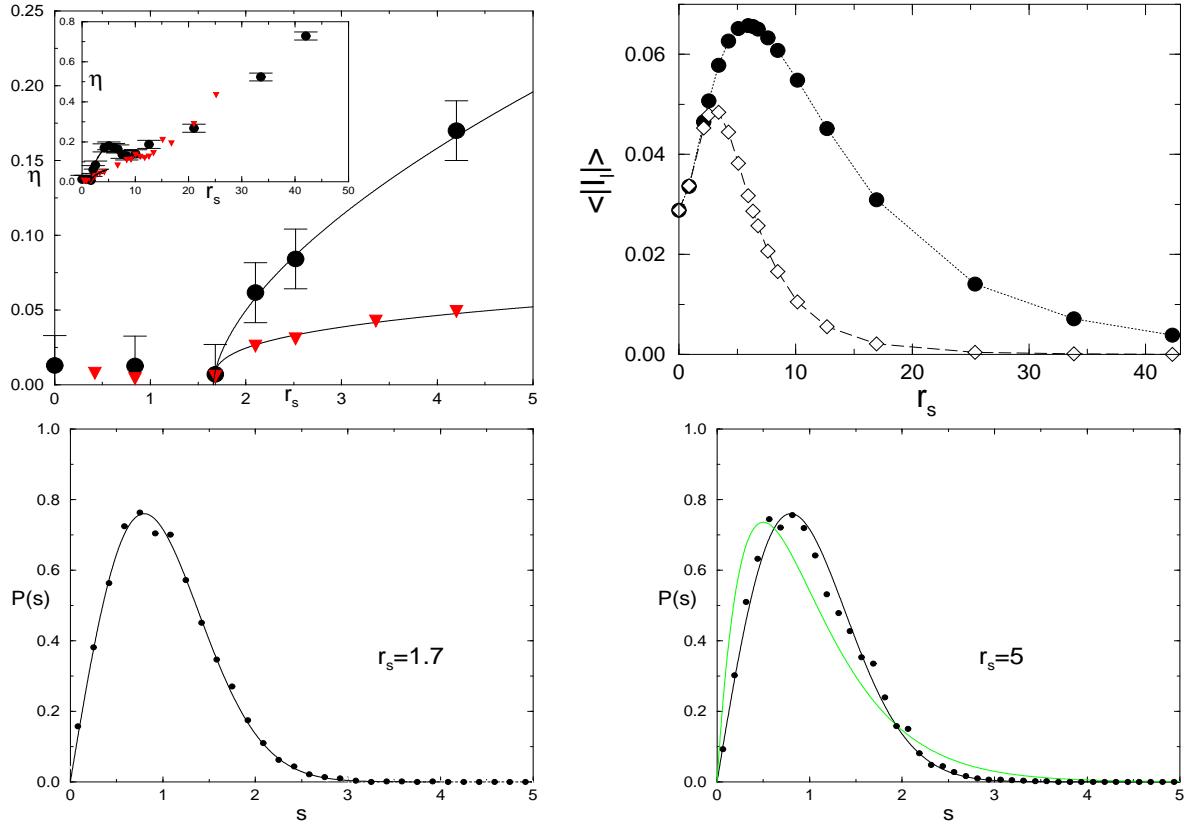


FIG. 6.1: En haut à gauche :  $\eta$  en fonction de  $r_s$  pour  $W = 5$ (cercles) et  $W = 3$ (triangles) montrant un décrochage à  $r_s^f$ . Insert : évolution de  $\eta$  à plus grande échelle. En haut à droite : Moyenne de la valeur absolue du courant permanent calculé exactement (cercles) et dans l'approximation d'Hartree-Fock(diamants). On constate une brisure d'HF à  $r_s^f$ . En bas : Distributions  $P(s)$  montrant que l'on a Wigner-Dyson(WD) à  $r_s = 1.7$ (à gauche). On dévie ensuite progressivement de WD (à droite). On a tracé en ligne continue la distribution (WD) et en tirets celle de semi-poisson.

Pour étudier l'évolution de la distribution  $P(s)$ , on utilise le paramètre spectral  $\eta$  que l'on définit ici :

$$\eta(P, r_s) = \frac{\int_0^{s_0} ds [P(s) - P_W(s)]}{\int_0^{s_0} ds [P_P(s) - P_W(s)]} \quad (6.1)$$

où  $s_0 = 0.4729$  est l'abscisse de la première intersection entre la distribution de Poisson  $P_P(s)$  et celle de Wigner  $P_W(s)$ . Ce paramètre vaut 1 si la distribution  $P$  est poissonnienne, 0 si elle suit la distribution de Wigner-Dyson (voir paragraphe (3.3)), et 0.39 si la distribution est semi-Poisson. La figure ((6.1) en haut à gauche) montre que le paramètre  $\eta$  permet de déterminer la fin du régime de Fermi et donc le seuil  $r_s^f$ . En effet  $\eta$  reste nul, et la statistique reste donc

Wigner-Dyson, jusqu'à la valeur  $r_s^f \sim 2$  correspondant à la première transition numérique dans les références [14,15]. On observe ensuite une augmentation soudaine du paramètre  $\eta$ , montrant que les états deviennent moins corrélés. On peut aussi remarquer un minimum local au niveau de la deuxième transition  $r_s^w \sim 10$ .

### Limite de validité de l'approximation d'Hartree-Fock :

On peut aussi repérer la première transition, qui est la fin du régime de Fermi, par le fait que les théories de champs moyens, comme Hartree-Fock (HF), ne sont plus efficaces. Ceci est en accord avec la remarque faite dans le chapitre précédent, où le seuil  $r_s^{fs}$  (pour des fermions avec spin) est repéré par la fin du mécanisme Hartree-Fock de Stoner. On trace dans le figure ((6.1) en haut à droite), le courant permanent longitudinal obtenu par diagonalisation exacte et celui obtenu par l'approximation d'Hartree-Fock. On constate que les fonctions d'onde HF cessent d'être exactes au niveau du seuil  $r_s^f \sim 2$  identique à celui repéré sur  $\eta$ .

#### 6.1.2 Evolution de $r_s^f$ avec le désordre

La distribution (WD) de  $\Delta E$  montre que les premiers niveaux sont très corrélés en dessous du seuil  $r_s^f$ . Ceci se remarque aussi sur la moyenne  $\langle \Delta E \rangle$  qui dépend très faiblement de l'interaction jusqu'à  $r_s^f$ . Ce comportement souligne que les deux premiers états ont la même dépendance en interaction. A désordre nul ( $W=0$ ), la transition correspond à un croisement des deux premiers niveaux ( $\Delta E = 0$ ), elle marque donc la fin du domaine où l'on peut décrire le système continûment à l'aide de l'état fondamental sans interaction. Avec désordre, le croisement de niveaux est évité, créant un gap qui s'accroît avec la force du désordre. A

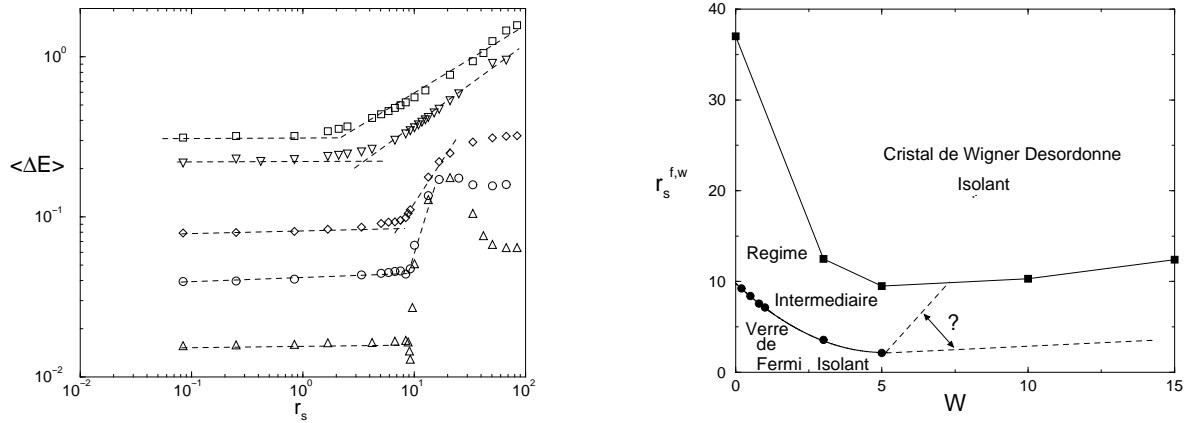


FIG. 6.2: A gauche :  $\langle \Delta E \rangle$  en fonction de  $r_s$  pour  $W = 0.2(\triangle)$ ;  $0.5(\circ)$ ;  $0.8(\diamond)$ ;  $3(\nabla)$ ;  $5(\square)$ . Les tirets sont des interpolations linéaires. A droite : Paramètre critique  $r_s^f$  (cercles) en fonction du désordre  $W$ , on a rajouté le paramètre  $r_s^w$  (carrés) tiré d'autres études [150]. La ligne continue est une interpolation à partir des points numériques. Les courbe en tirets souligne l'incertitude sur l'existence du régime intermédiaire à plus fort désordre.

$W = 5$ , on n'a plus de trace du croisement de niveaux (figure(6.2) à gauche). On repère alors

la transition par le changement de comportement de  $\langle \Delta E \rangle$  qui est indépendant de  $r_s$  avant  $r_s^f$ , mais qui ne l'est plus après<sup>1</sup>. Dans la figure ((6.2) à gauche) on trace  $\langle \Delta E \rangle$  en fonction de  $r_s$  pour différents désordres  $W$ . Des interpolations linéaires donnent les différents régimes de  $\langle \Delta E \rangle$ . On définit  $r_s^f$  comme l'intersection des ces droites. On trace ensuite dans la figure (6.2) de droite, l'évolution de  $r_s^f$  avec le désordre. En rajoutant les seuils  $r_s^w$  tirés d'études numériques précédentes [150], on obtient un diagramme de phase en fonction du désordre, délimitant le régime intermédiaire.

## 6.2 Structure du régime intermédiaire

On veut comprendre la structure de l'état fondamental dans le régime intermédiaire ( $r_s^f < r_s < r_s^w$ ). Pour cela on commence par étudier les distances moyennes entre particules et leurs fluctuations. L'amplitude des fluctuations est parfois utilisée pour déterminer un seuil de fusion (voir (1.2.2)). On utilise ici les dépendances en  $U$  des fluctuations pour déterminer les seuils.

### 6.2.1 Etude des distances entre particules

Soit  $|i, j, k, l\rangle = c_i^+ c_j^+ c_k^+ c_l^+ |\emptyset\rangle$  un état quelconque à quatre particules de la base des sites. Les quatre sites  $(i, j, k, l)$  définissent, deux à deux, six distances inter-sites. On nomme ces six distances  $d_{ijkl}(p)$  rangées par ordre croissant :  $p = 1, \dots, 6$  et  $d_{ijkl}(p-1) \leq d_{ijkl}(p)$ . A l'aide des moments  $d_p^n$  ( $n \in \mathbb{N}$ ), on définit alors les six distances  $d_p$  et leurs fluctuations  $u_r(p)$  associées à l'état fondamental  $|\Psi_0\rangle$  :

$$d_p^n = \sum_{i < j < k < l} [d_{ijkl}(p)]^n \overline{|\langle \Psi_0 | i, j, k, l \rangle|^2} \text{ avec } d_p = d_p^1 \text{ et } u_r(p) = \left( \frac{d_p^2}{(d_p^1)^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.2)$$

Dans une limite de très forte interaction, les particules cristallisent sous forme d'un carré de côté 3 (en unité de pas du réseau  $a$ ) accroché sur les sites  $(i_1, i_2, i_3, i_4)$  (voir figure (6.4)). Les quatre distances minimales ( $d_1, d_2, d_3, d_4$ ) devront donc tendre vers 3 qui est la longueur des quatre cotés du carré. Les deux autres distances ( $d_5, d_6$ ) tendent vers les diagonales de longueur  $3\sqrt{2} \approx 4.24$ .

D'autre part on peut obtenir des développements perturbatifs de  $u_r(p)$  et  $d_p$ . Par exemple dans la limite de forte interaction, l'état fondamental est à l'ordre 1 :

$$|\Psi_0(r_s)\rangle = |\Psi_0(\infty)\rangle + \sum_{\alpha=1}^{16} \frac{t}{E_\alpha - E_0^\infty} |\Psi_\alpha\rangle \quad (6.3)$$

où les états  $|\Psi_\alpha\rangle$  sont les trapèzes obtenus en bougeant une particule du carré d'un pas du réseau (voir figure (6.4)). Sachant que  $E_\alpha - E_0^\infty \propto U$ , on développe alors les fonctions  $u_r(p)$  et  $d_p$  en puissance de  $t/U \sim r_s^{-1}$ . Les comportements en loi de puissance délimitent alors le

---

<sup>1</sup>Ce critère doit nous donner les mêmes seuils que l'étude de  $\eta$ , car on repère aussi les corrélations entre niveaux.

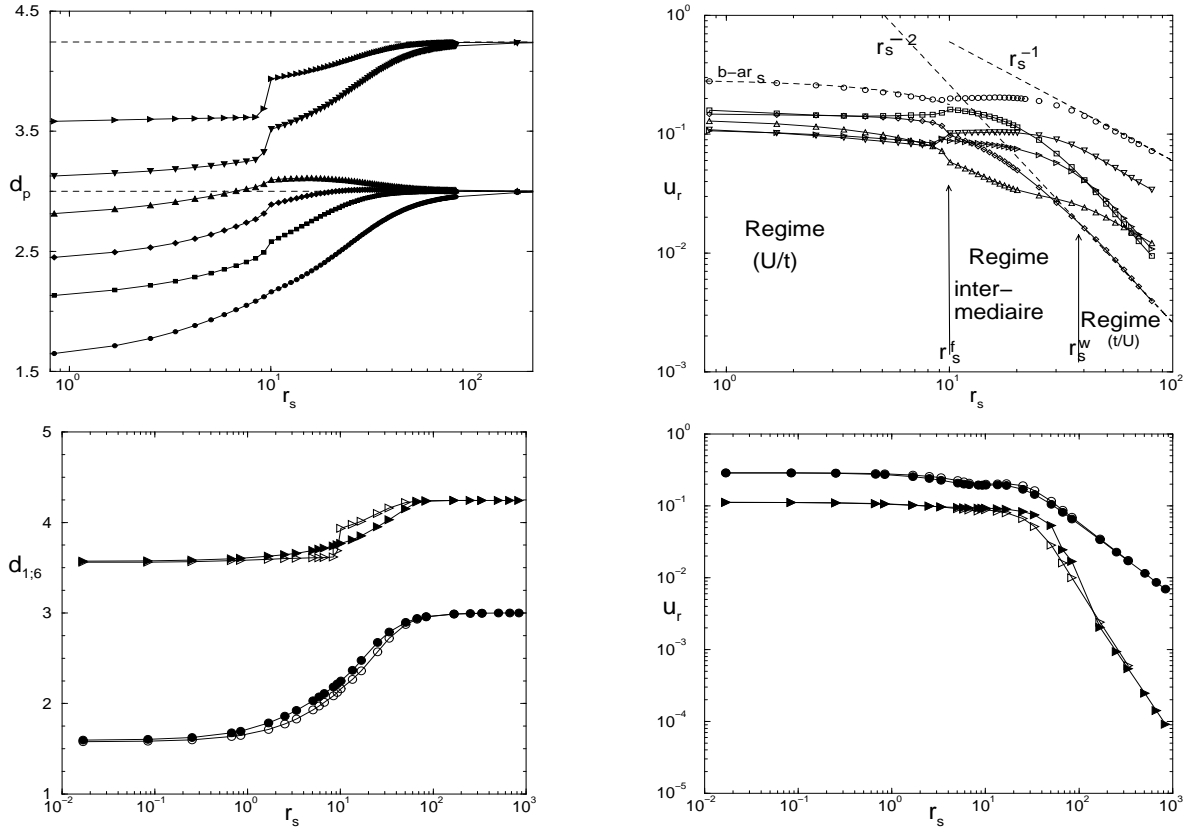


FIG. 6.3: En Haut à gauche : Distances entre particules  $d_p$  ordonnées par ordre croissant pour  $W = 0.1$ .  $d_1$ (cercles);  $d_2$ (carrés);  $d_3$ (diamants);  $d_4$ (triangles haut);  $d_5$ (triangles bas);  $d_6$ (triangles droite). En Haut à droite : Fluctuations  $u_r(p)$  correspondant aux distances  $d_p$ (avec les mêmes symboles). En bas à gauche : Comparaison des distances minimale  $d_1$  et maximale  $d_6$  pour  $W = 0.1$ (symboles vides) et  $W = 5$ (symboles pleins). En bas à droite : Comparaison des fluctuations  $u_r(1)$  et  $u_r(6)$  pour  $W = 0.1$ (symboles vides) et  $W = 5$ (symboles pleins). Les lignes continues relient les points numériques. Les tirets donnent les comportements asymptotiques dans les régimes extrêmes :  $b = 0.28$  et  $a = -0.01$ .

régime ( $r_s^w < r_s$ ) où les distances  $d_p$  sont proches de celle du carré et où les fluctuations sont petites<sup>2</sup>. De même à faible interaction, on a un régime perturbatif en puissance de  $U/t$ , où l'on peut suivre continûment l'état fondamental depuis celui sans interaction. Ce régime finit au croisement de niveaux évité à  $r_s^f$ .

Pour  $W = 0.1$ , on trace les fluctuations  $u_r(p)$  et les distances  $d_p$  dans la figure (6.3 En haut). On distingue trois régimes sur les fluctuations  $u_r(p)$  (à droite) : un régime d'interaction faible en  $U/t$  se finissant à  $r_s^f \sim 10$ ; un régime d'interaction forte avec des dépendances en  $t/U$  qui commence à  $r_s^w \sim 37$ ; et entre les régimes de forte et faible interaction se trouve un régime intermédiaire. Ce régime intermédiaire montre trois longueurs bien établies ( $d_3, d_4, d_6$  figure de gauche) et qui fluctuent peu. Ces distances correspondraient donc à une configuration du

<sup>2</sup>car le carré est un objet rigide



FIG. 6.4: Un état fondamental possible à  $U = \infty$  et un état trapèze  $|\Psi_\alpha\rangle$  contribuant à l'ordre 1 en perturbation.

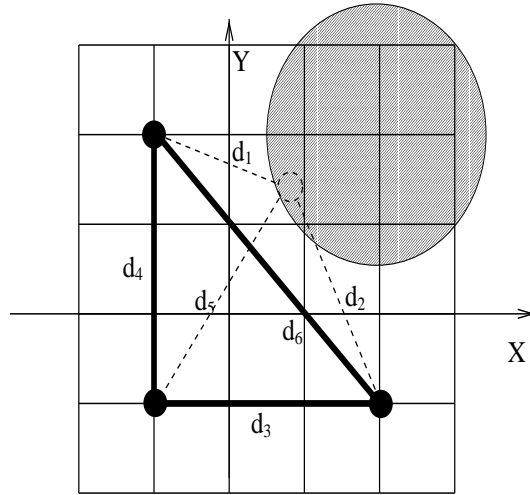


FIG. 6.5: Dans le régime intermédiaire 3 distances sont bien établies et fluctuent peu :  $d_3, d_4, d_6$  alors que les 3 autres le sont moins. On a une cristallisation partielle de trois particules.

type de celle de la figure(6.5), où trois particules sont partiellement cristallisées et la dernière plus délocalisée. Cette vision est cohérente avec une vision d'un état à la fois solide et liquide d'Andreev-Lifshitz(voir (1.2.2)).

On constate ensuite sur les distances minimale et maximale (figure (6.3 En bas), que ce comportement change peu avec le désordre. Toutefois le désordre a un effet différent sur la partie solide et la partie liquide. Il facilite la cristallisation partielle des trois particules car si on considère à ( $W = 5$ ) la distance maximale :  $d_6$  tend plus rapidement vers  $3\sqrt{2}$  et ses fluctuations sont diminuées. Le désordre par contre retarde la cristallisation de la dernière particule qui garde ses propriétés liquide plus longtemps :  $d_1$  tend plus lentement vers 3 et ses fluctuations augmentent. Toutefois, ces variations sont faibles et on peut penser que l'existence de ce régime intermédiaire ne dépend pas du désordre et qu'il persiste à désordre nul.

### 6.2.2 Etude des projections à désordre nul sur les ondes planes et les cristaux déformés

Pour comprendre mieux la structure du fondamental dans le régime intermédiaire où  $r_s^f < r_s < r_s^w$ , on projette ce dernier sur les bases propres des limites sans énergie cinétique  $t/U = 0$  ou sans interaction  $U/t = 0$ . On présente ces bases dans les paragraphes suivants pour un désordre nul ( $W = 0$ ). Pour  $0 < r_s < r_s^f$  l'état fondamental est dégénéré quatre fois et on le notera  $|\Psi_0^\beta(r_s)\rangle_{\beta=1,\dots,4}$ . A  $r_s = r_s^f$  il y a un croisement de niveaux entre les états  $|\Psi_0^\beta(r_s)\rangle$  et un état excité non-dégénéré qui devient le nouvel état fondamental. Donc pour  $r_s > r_s^f$  on notera l'état fondamental non-dégénéré simplement  $|\Psi_0(r_s)\rangle$ .

#### Limite fortement corrélée : ( $t/U=0$ )

En l'absence d'énergie cinétique, les états propres sont donnés par les déterminants de Slater sur site  $|i, j, k, l\rangle = c_i^+ c_j^+ c_k^+ c_l^+ |\emptyset\rangle$ . On trace dans la figure (6.6) les configurations donnant les états d'énergies minimales qui sont : le carré, les deux types de parallélogrammes, les deux types de losanges et les quatre types de trapèzes. Pour une même configuration, les différents types sont identiques par rotations ou réflexions, mais ne peuvent être superposés par translation.

En l'absence de désordre, on a l'invariance par translation et l'impulsion totale  $\vec{K}$  est un nombre quantique qui est conservé quand on varie  $t/U$ . Si on se place dans un sous-espace à  $\vec{K}$  fixé, l'état propre associé à un motif est délocalisé. Pour les carrés on a par exemple :

$$|S(\vec{K})\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^2}} \sum_{i_x, i_y=1}^L \exp[i\vec{K}\vec{i}] c_{(i_x, i_y)}^+ c_{(i_x, i_y+3)}^+ c_{(i_x+3, i_y)}^+ c_{(i_x+3, i_y+3)}^+ \quad (6.4)$$

$\vec{K}$  correspond aussi à l'impulsion du centre de masse du carré qui se déplace sur le réseau ( $3 \times 3$ ) formé par les croix (voir figure(6.6)). L'état d'énergie minimale pour le centre de masse étant dans le sous-espace d'impulsion nulle ( $\vec{K} = \vec{0}$ ), le fondamental est aussi dans ce sous-espace dans la limite corrélée. Dans ce sous-espace on note  $|S\rangle$  le carré délocalisé ;  $|P(J)\rangle_{j=1,2}$  les deux parallélogrammes délocalisés ;  $|L(J)\rangle_{j=1,2}$  les deux losanges délocalisés ; et  $|T(J)\rangle_{j=1,\dots,4}$  les quatre trapèzes délocalisés.

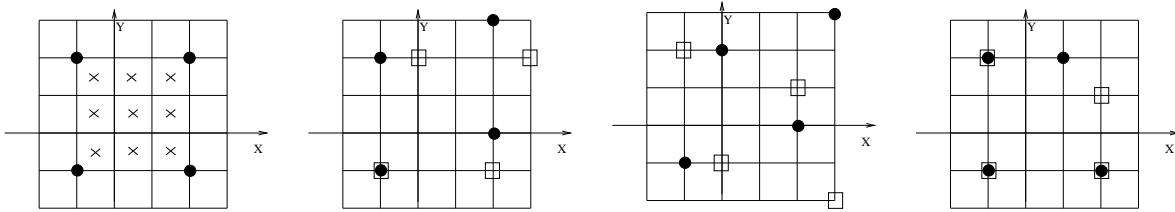


FIG. 6.6: Motifs sur sites contribuant à l'état intermédiaire. De gauche à droite on dessine : un état carré (les croix montrent les positions possibles du centre de masse lorsque l'on translate ce carré) ; puis les deux types de parallélogrammes(cercles et carrés) ; puis les deux types de losanges(cercles et carrés) ; et enfin deux parmi les quatre configurations de trapèzes.

### Limite libre : ( $U/t=0$ )

Sans interaction, les états propres sont des déterminants de Slater (DS) d'ondes planes, déterminés par leur impulsions :  $c_{\vec{k}_1}^+ c_{\vec{k}_2}^+ c_{\vec{k}_3}^+ c_{\vec{k}_4}^+ |\emptyset\rangle$ . Les impulsions de chaque particule  $\vec{k}_i = (k_i^x; k_i^y)$  sont quantifiées dans les directions  $x$  et  $y$  suivant le réseau. Dans un réseau  $6 \times 6$ , on a  $\vec{k}_i = \frac{2\pi}{6}(n_x; n_y)$  avec  $n_x$  et  $n_y$  des entiers de 0 à 5. L'énergie à une particule associée est  $\epsilon_{\vec{k}_i} = -2t \cos k_i^x - 2t \cos k_i^y$ . On note  $\vec{K} (= \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4)$  l'impulsion totale d'un état à 4 particules  $c_{\vec{k}_1}^+ c_{\vec{k}_2}^+ c_{\vec{k}_3}^+ c_{\vec{k}_4}^+ |\emptyset\rangle$ . L'énergie de cet état est  $E = \sum_{i=1,4} \epsilon_{\vec{k}_i}$ . L'absence de désordre entraîne l'existence de nombreuses symétries dans le plan  $(k^x; k^y)$ , comme les rotations d'angles  $\pi/2$  ou encore les réflexions. Les états propres ont donc une grande dégénérescence. Par exemple l'état fondamental  $|K_0(\beta)\rangle_{\beta=1,\dots,4}$  est dégénéré 4 fois avec une énergie  $E_0 = -13t$ ; la première excitation 25 fois avec une énergie  $-12t$ ; la deuxième excitation  $|K_2(\alpha)\rangle_{\alpha=1,\dots,64}$  est dégénérée 64 fois avec une énergie  $-11t$ ; la troisième excitation  $|K_3(\alpha)\rangle_{\alpha=1,\dots,180}$  est dégénérée 180 fois avec une énergie  $-10t$ ; la quatrième excitation 384 fois avec une énergie  $-9t$ ; etc ....

Les impulsions possibles de l'état fondamental sans interaction  $\vec{K}_0 = \frac{2\pi}{6}\{(1;1), (-1;-1), (1;-1), (-1;1)\}$  sont non-nulles. Or on a vu que le fondamental dans la limite corrélée se trouve dans le sous-espace d'impulsion nulle. Le fondamental change donc de sous-espace d'impulsion au niveau du croisement de niveau à  $r_s^f$ .

Au dessus de  $r_s^f$ , on s'intéressera alors aux états excités ayant une impulsion totale nulle  $\vec{K} = \vec{0}$ . Ces états se trouvent parmi les premières et les quatrièmes excitations. On a 4 déterminants de Slater (DS) d'impulsion nulle parmi les premières excitations d'énergies  $-12t$  que l'on note  $|K_1(\beta)\rangle_{\beta=1,\dots,4}$ . On a 16 (DS) d'impulsion nulle parmi les quatrièmes excitations d'énergies  $-9t$  que l'on note  $|K_4(\gamma)\rangle_{\gamma=1,\dots,16}$ . On dessine dans la figure (6.7) le remplissage des états à un corps  $(k_i^x; k_i^y)$  donnant des états  $|K_1(\beta)\rangle$  et  $|K_4(\gamma)\rangle$ . On obtient les états restant par réflexions et rotations dans le plan. On étudie dans la suite la projection du fondamental dégénéré  $|\Psi_0^\alpha(r_s)\rangle$

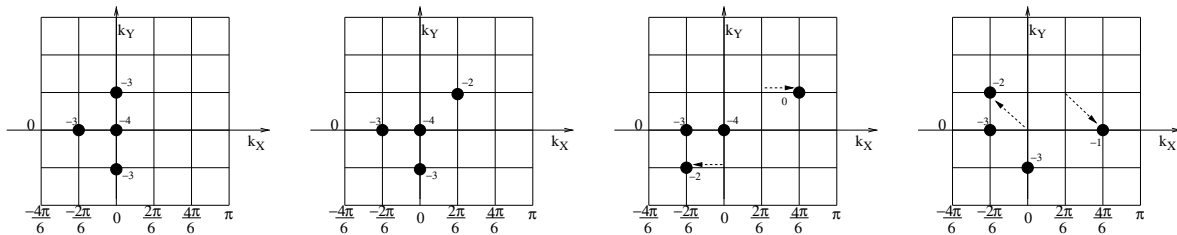


FIG. 6.7: On dessine de gauche à droite : un état  $|K_0(\beta)\rangle$  d'impulsion non-nulle qui est le fondamental sans interaction. Les trois autres  $|K_0(\beta)\rangle$  se déduisent par rotation. On dessine ensuite un des 4 états  $|K_1(\beta)\rangle$ . Les deux derniers motifs sont deux des 16 états  $|K_4(\gamma)\rangle$ . Les chiffres à côté des états remplis sont les énergies de ces états.

(pour  $r_s \leq r_s^f$ ) et celle du fondamental non-dégénéré  $|\Psi_0^\alpha(r_s)\rangle$  (pour  $r_s > r_s^f$ ) sur les différents états  $|K_i\rangle$  définis ci-dessus.

### Une nature “liquide-solide” du fondamental :

On étudie la projection de l'état fondamental sur les états décrits dans les deux précédents paragraphes (voir figure(6.8) à gauche). Pour  $0 < r_s < r_s^f$  on a une grande projection  $P_0(r_s, 0)$



sur les quatre états propres sans interaction  $|K_0(\beta)\rangle$  :

$$P_0(r_s, 0) = \sum_{\beta=1}^4 |\langle \Psi_0^\alpha | K_0(\beta) \rangle|^2 \quad (6.5)$$

Il y a aussi de plus petites projections  $P_0(r_s, 2)$  sur les 64 deuxièmes excitations et  $P_0(r_s, 3)$  sur les 180 troisièmes excitations.

Au dessus de  $r_s^f$ , les projections précédentes deviennent nulles ou négligeables. Le fondamental non-dégénéré, appartenant au sous-espace d'impulsion nulle, a des projections importantes  $P_0(r_s, 1)$  sur les quatre états  $|K_1(\beta)\rangle$  et  $P_0(r_s, 4)$  sur les 16 états  $|K_4(\gamma)\rangle$  (voir figure(6.8) à gauche).

$$P_0(r_s, 1) = \sum_{\beta=1}^4 |\langle \Psi_0 | K_1(\beta) \rangle|^2 \text{ et } P_0(r_s, 4) = \sum_{\gamma=1}^{16} |\langle \Psi_0 | K_4(\gamma) \rangle|^2 \quad (6.6)$$

On constate qu'au dessus de  $r_s^f$  une grande partie du fondamental est un liquide excité décrit par une vingtaine de déterminants de Slater de niveaux excités et d'impulsion nulle ( $\vec{K} = \vec{0}$ ). On étudie ensuite les projections sur la base des sites. On appelle  $P_\infty(r_s, 0)$  la projection de

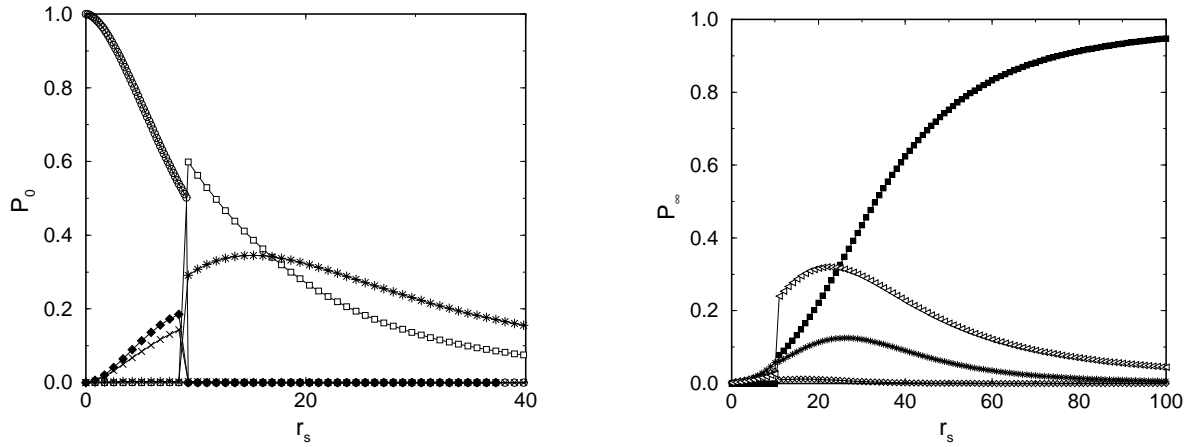


FIG. 6.8: A gauche : Projections  $P_0(r_s, i)$  du fondamental sur les états d'ondes planes  $|K_i\rangle$  en fonction de  $r_s$ . Projection sur les 4  $|K_0(\beta)\rangle$  (cercles vides), sur les 4  $|K_1(\beta)\rangle$  (carrés vides), sur les 64  $|K_2(\alpha)\rangle$  (diamants pleins), sur les 180  $|K_3(\alpha)\rangle$  (croix) et sur les 16  $|K_4(\delta)\rangle$  (étoiles). A droite : Projection  $P_\infty(r_s)$  en fonction de  $r_s$  du fondamental sur : le carré  $|S\rangle$  (carré pleins), les 2 parallélogrammes  $|P\rangle$  (étoiles), les 2 losanges  $|L\rangle$  (diamants) et les 14 trapèzes  $|T\rangle$  (triangles).

l'état fondamental sur le carré délocalisé  $|S\rangle$ ;  $P_\infty(r_s, 1)$  la projection sur les parallélogrammes;  $P_\infty(r_s, 2)$  la projection sur les losanges et  $P_\infty(r_s, 3)$  la projection sur les trapèze. On constate qu'en deça de  $r_s^f$ , les projections  $P_\infty$  sont négligeables. Au dessus de  $r_s^f$ , la projection sur le carré augmente jusqu'à ce que la projection soit totale et que le fondamental soit un cristal de Wigner rigide. Les autres projections sont maximales pour des valeurs intermédiaires de  $r_s$ .

Donc une partie grandissante de l'état fondamental se projette sur l'état carré sans toutefois le décrire totalement dans la région intermédiaire. On trace dans la figure (6.9) la somme des projections  $P_\infty^t = \sum_{p=0}^3 P_\infty(r_s, p)$ . Dans la région intermédiaire ( $r_s \sim 20$ ), cette projection est de l'ordre de 70% et ne décrit pas totalement le fondamental. De même la somme des projection  $P_0^t = P_0(r_s, 1) + P_0(r_s, 4)$ , sur les états  $|K_1\rangle$  et  $|K_4\rangle$  qui dominent dans la région intermédiaire, est aussi de l'ordre de 70%. Pour obtenir une meilleure projection, on combine les différents sous-espaces. On étudie alors la projection du fondamental dans le sous-espace engendré par les états  $\{|1|S\rangle, 2|P(J)\rangle, 2|L(J)\rangle, 4|T(J)\rangle, 4|K_1(\beta)\rangle, 16|K_4(\beta)\rangle\}$  de dimension 28. Ces états n'étant pas orthogonaux, on procède à une réorthogonalisation de Schmitt pour obtenir la projection  $P_t$  du fondamental dans ce sous-espace. On trace  $P_t$  dans la figure(6.9). La projection est toujours supérieure à 93% dans la région intermédiaire. L'état fondamental se projette donc presque totalement dans un petit sous-espace comprenant des états de types cristal et des états de type liquide excité. On a donc une confirmation de la nature "solide-liquide" de cet état intermédiaire.

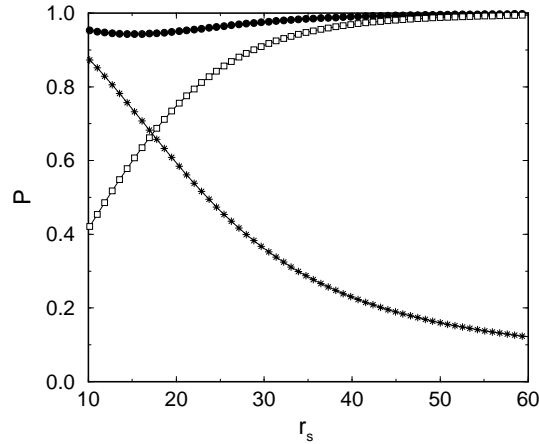


FIG. 6.9: Projection de l'état fondamental  $P_0^t(r_s)$ (étoiles) dans le sous-espace engendré par  $(|K_1\rangle; |K_4\rangle)$ . Projection de l'état fondamental  $P_\infty^t(r_s)$ (carrés vides) dans le sous-espace engendré par  $(1|S\rangle; 2|P(J)\rangle; 2|L(J)\rangle; 4|T(J)\rangle)$ . Projection totale  $P^t$ (cercles pleins) dans le sous-espace engendré par tous les précédents états.

### 6.2.3 Conclusion

On résume en conclusion les principaux résultats obtenus par l'étude numérique de quatre fermions sans spin dans un réseau  $6 \times 6$  :

- On a repéré le paramètre critique  $r_s^f$  sur deux quantités. La première est la distribution de la première excitation pour le système désordonné. On constate que cette distribution s'éloigne de la distribution de Wigner-Dyson au niveau du seuil critique  $r_s^f$ . La deuxième est le courant permanent dans l'approximation d'Hartree-Fock. On constate que ce courant cesse d'être exact au niveau du seuil. Dans le problème sans désordre, le seuil critique correspond

à un croisement de niveaux. En suivant la trace de ce croisement de niveaux sur la première excitation, on obtient l'évolution du paramètre critique avec le désordre  $r_s^f(W)$ .

- L'étude des distances entre particules, nous a montré que l'on peut aussi déceler le régime intermédiaire sur les fluctuations  $u_r$ . Les fluctuations montrent aussi que, dans le régime intermédiaire, on a une partie de l'état qui est bien cristallisé, puisque trois distances sont bien formées et rigides, alors que les trois autres sont moins bien définies et fluctuent plus. La cristallisation se fait donc en deux temps. Ces affirmations sont confirmées par l'étude du cas sans désordre, où l'état intermédiaire est bien décrit par des états cristaux et des états liquides excités. L'état intermédiaire pourrait donc être une forme de supersolide prévu par Andreev et Lifshitz.



## Troisième partie

# Effet de la portée des interactions à une dimension



# Chapitre 7

## Présentation du modèle de deux particules en dimension un

---

Dans cette dernière partie, on s'intéresse au cas unidimensionnel. On présente, dans ce chapitre, le modèle qu'on étudiera numériquement dans le chapitre suivant. On choisit d'étudier le système le plus simple : deux particules en interaction sur une chaîne désordonnée de  $L$  sites avec des conditions aux bords périodiques. Les deux particules sont des fermions de spins  $(1/2)$  que l'on supposera dans un état singulet de spins opposés ( $S_Z = 0$ ). La partie de spin des fonctions d'onde étant antisymétrique, la partie spatiale est symétrique. En se restreignant à l'étude de la partie spatiale, ce problème est donc équivalent à l'étude de deux bosons sans spin. Ce problème, que l'on nomme (TIP), a été très largement étudié. On le présente ici en soulignant l'évolution des états propres quand on varie la force des interactions.

### 7.1 Modèle TIP

#### 7.1.1 Le hamiltonien TIP

Nos particules pouvant être considérées comme des bosons sans spin, on réexprime le hamiltonien du problème (TIP), à l'aide des opérateurs bosoniques  $c_i^+$  de création d'une particule au site  $i$ . Ces opérateurs commutent entre eux. On définit l'opérateur nombre d'occupation au site  $i$  :  $n_i = c_i^+ c_i$  qui a pour valeurs propres 0,1 ou 2. Le hamiltonien du système étudié comporte deux termes. Le premier terme est le hamiltonien d'Anderson,

$$H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^+ c_j + W \sum_i v_i n_i. \quad (7.1)$$

avec les potentiels sur les sites  $\{v_i\}$  pris aléatoirement dans l'intervalle  $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ . Le deuxième terme est le hamiltonien d'interaction  $H_U$  qui sera de deux formes selon que l'on considère

une interaction locale de type Hubbard :

$$H_U^H = U \sum_i n_i(n_i - 1) \quad (7.2)$$

ou que l'on considère une interaction à longue portée de type Coulombienne :

$$H_U^C = U \sum_i n_i(n_i - 1) + \frac{U}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ 0 < |i-j| \leq L/2}}^L \frac{n_i n_j}{|i-j|} \quad (7.3)$$

On pourra écrire de manière plus générale :

$$H_U = \sum_{i,i'} U^{ii'} n_i n_{i'} \quad (7.4)$$

avec  $U^{ii'} = \frac{U}{2}(2\delta_{ii'} - 1)$  dans le cas d'une interaction locale et  $U_{\sigma\sigma'}^{ii'} = \frac{U}{2}[(2\delta_{ii'} - 1) + \frac{1-\delta_{ii'}}{|i-i'|}]$  dans le cas d'une interaction Coulombienne non-écrantée.

### 7.1.2 Réécriture du hamiltonien dans la base sans interaction

On note  $\{|i\rangle = c_i^+|\emptyset\rangle\}_{i=1,\dots,L}$ . Ces états forment une base de l'espace des états à une particule. On note  $\{|\alpha\rangle\}$  les états propres à un-corps sans interaction. Ils vérifient :

$$H_0|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\alpha\rangle \quad \text{avec} \quad |\alpha\rangle = \sum_i \alpha(i)|i\rangle = d_\alpha^+|\emptyset\rangle \quad (7.5)$$

où  $d_\alpha^+$  est l'opérateur création d'une particule dans l'état  $|\alpha\rangle$  et les  $\alpha(i)$  les fonctions d'ondes spatiales associées. Dans le cas sans désordre ( $W = 0$ ), les  $\{\alpha(i)\}$  sont des ondes planes dont les vecteurs d'ondes  $k_\alpha$  sont quantifiés<sup>1</sup>. On peut, à l'aide des opérateurs  $d_\alpha^+$ , réécrire le hamiltonien sous la forme :

$$H = \sum_\alpha \epsilon_\alpha d_\alpha^+ d_\alpha + \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \left[ \sum_{i,i'} U^{ii'} \alpha^*(i) \beta(i) \gamma^*(i') \delta(i') \right] d_\alpha^+ d_\beta d_\gamma^+ d_\delta \quad (7.6)$$

Les termes dans la somme entre crochets sont les éléments de couplages, que l'on nommera génériquement  $Q$ . On les indexera éventuellement par  $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$  pour préciser les états qui sont couplés :  $Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$ .

### 7.1.3 Délocalisation induite par les interactions

On appelle  $L_2$  la longueur de localisation d'un état à deux particules. En l'absence d'interaction  $L_2$  est du même ordre de grandeur que la longueur de localisation à une particule  $L_1$ . En présence d'une interaction locale, seuls les états ayant un recouvrement de leur fonction

---

<sup>1</sup>  $k_\alpha = \frac{\pi p}{L+1}$ ; et  $p = 0, \dots, L-1$  (bord dur) ou  $k_\alpha = \frac{2\pi p}{L}$ ; et  $p = 0, \dots, L-1$  (périodique)  
 $\alpha(n) = \frac{e^{ik_\alpha n}}{\sqrt{L}}$  et  $\epsilon_\alpha = -2t \cos(k_\alpha)$



d'onde interagissent. La fraction d'états en interaction est alors proportionnelle à  $\frac{L_1}{L}$  (qui est le nombre de possibilités, dans un "volume"  $L$ , de mettre deux particules dans un même "volume"  $L_1$ ). Shepelyansky a montré que ces quelques états subissent une délocalisation induite par l'interaction [130]. On a ainsi :

$$\frac{L_2}{L_1} = U^2 L_1. \quad (7.7)$$

La dépendance en interaction étant en  $U^2$ , l'accroissement  $\frac{L_2}{L_1}$  est indépendant du fait que l'interaction soit attractive ( $U < 0$ ) ou répulsive ( $U > 0$ ). Cet effet de délocalisation a été confirmé dans de nombreuses études numériques utilisant différentes techniques comme la diagonalisation exacte [153] ou les matrices de transfert [54] ou encore par calcul de la résolvante<sup>2</sup> [149]. Toutefois toutes les études ne donnent pas la même dépendance de l'accroissement en  $L_1$ . En effet on a  $L_2 \approx L_1^{1.65}$  dans [54] alors que  $L_2 \approx L_1^2$  dans [149] ou encore  $L_2 \approx L_1^{1.5}$  dans [82, 139]. On ne rentre pas ici dans cette polémique. Toutefois on remarquera (paragraphe (8.1.2)) qu'en présence d'interactions Coulombienne, on retrouve la dépendance donnée par Shepelyansky  $L_2 \approx L_1^2$ .

## 7.2 Spectre de deux particules

On décrit ici l'allure du spectre des états du problème TIP. Partant du problème sans interaction, on augmente progressivement cette dernière. On observe alors comment varient les énergies des états propres. On distingue deux limites que l'on décrit dans les paragraphes suivants.

### 7.2.1 La limite sans interaction : états 2FP

Sans interaction, le problème se réduit à celui d'Anderson, il faut alors résoudre l'hamiltonien  $H_0$ . Les états  $\{|ij\rangle = c_i^\dagger c_j^\dagger |\emptyset\rangle\}_{i,j=1,\dots,L}$  forment une base de l'espace des états à deux particules. Ces états étant symétriques<sup>3</sup>, la dimension de l'espace est  $N_{Ft} = \frac{L(L+1)}{2}$ . Pour deux particules sans interaction, les énergies propres  $E_{\alpha\beta}$  et les vecteurs propres  $|\alpha\beta\rangle$  se déduisent du problème à une particule par :

$$H_0|\alpha\beta\rangle = (\epsilon_\alpha + \epsilon_\beta)|\alpha\beta\rangle = E_{\alpha\beta}|\alpha\beta\rangle \quad (7.8)$$

$$|\alpha\beta\rangle = \sum_{i,j=1}^L \frac{\alpha(i)\beta(j)}{\sqrt{2}} |ij\rangle \quad (7.9)$$

Les états libres  $|\alpha\beta\rangle$  à deux particules seront nommés les états (2FP). On déduit<sup>4</sup> alors la fonction d'onde de l'état  $|\alpha\beta\rangle$  aux sites  $n$  et  $m$  :

$$\langle\alpha\beta|nm\rangle = \frac{\alpha(n)\beta(m) + \alpha(m)\beta(n)}{\sqrt{2}} \quad (7.10)$$

---

<sup>2</sup> $G(z) = (z - H)^{-1}$  dont la dépendance en  $L$  fournit  $L_2$ .

<sup>3</sup>les opérateurs  $c_i^\dagger$  et  $c_j^\dagger$  commutent  $[c_i^\dagger, c_j^\dagger] = [c_i, c_j] = 0$ ;  $[c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}$ ;  $[n_i, c_j^\dagger] = c_i^\dagger \delta_{ij}$

<sup>4</sup> $\langle nm|ij\rangle = \delta_{ni}\delta_{mj} + \delta_{nj}\delta_{mi}$

On note que dans le cas sans désordre on aura :

$$\langle \alpha\beta | nm \rangle = \frac{e^{i(k_\alpha n + k_\beta m)} + e^{i(k_\alpha m + k_\beta n)}}{\sqrt{2L}} \quad \text{et} \quad E_{\alpha\beta} = -2t[\cos k_\alpha + \cos k_\beta] \quad (7.11)$$

### 7.2.2 La limite de forte interaction : états moléculaires

Dans la limite de forte interaction ( $U \rightarrow \infty$ ), les états propres qui ressentent l'interaction tendent vers les états propres de l'hamiltonien  $H_U$ . Les états propres de  $H_U$  seront appelés états moléculaires car ce sont les états où la distance entre les particules est fixée.

#### Interaction locale $H_U^H$

Les états propres de l'interaction locale  $H_U^H$  sont les états doublement occupés  $|ii\rangle$ . Il n'y a donc que  $L$  états qui ressentent l'interaction. Le spectre se sépare donc en deux bandes (voir figure(7.1)(c)) : une première bande de  $L$  "états moléculaires"  $|ii\rangle$  d'énergies  $E \approx 2U + 2Wv_i$  et une deuxième bande formée de  $\frac{L(L-1)}{2}$  états, dits 'bosons de coeur dur', qui ne ressentent par l'interaction locale. Ces derniers correspondent aux déterminants de Slater des états à une particule<sup>5</sup> que l'on resymétrise de manière à avoir de bons états du problème bosonique. Ces états sont présentés dans les travaux de Silvestrov *et al* [133].

#### Interaction Coulombienne $H_U^C$

Dans le cas de l'interaction Coulombienne tous les états ressentent l'interaction. Les états propres de  $H_U^C$  sont les états moléculaires  $|i; i+p\rangle$ , où les deux particules sont distantes de  $p$ . Leur énergie est  $E = \frac{U}{p} + W(v_i + v_{i+p})$  si  $p \neq 0$  et  $E = 2U + 2Wv_i$  sinon. Si le nombre de sites  $L$  sur l'anneau est pair, la taille des molécules  $p$  varie entre 0 et  $\frac{L}{2}$ . Le spectre se décompose alors en  $\frac{L}{2}$  sous-bandes de  $L$  états auxquelles on rajoute une dernière sous-bande de  $\frac{L}{2}$  états correspondant aux états  $p = \frac{L}{2}$ . Les bandes sont centrées autour des énergies  $E \approx \frac{U}{p}$  (voir figure(7.1)(d)). Quand  $L$  est impair,  $p$  varie entre 0 et  $\frac{L-1}{2}$  et le spectre se décompose en  $\frac{L+1}{2}$  sous-bandes de  $L$  états.

#### Densité d'états

On illustre la variation des énergies propres ( $\{E_l(U)\}_{l=0,\dots,N_{Ft}}$ ) en traçant la densité d'états à deux particules  $\rho(E)$ , pour différentes valeurs de  $U$  (Figure(7.1)).

$$\rho(E) = \sum_l \delta(E - E_l(U)) \quad \text{et} \quad N(E) = \int_{-\infty}^E \rho(E') dE' \quad (7.12)$$

Partant de la bande des états d'énergie sans interaction ( $-4t \leq E_{\alpha\beta} \leq 4t$ ), on voit progressivement sortir les bandes d'états moléculaires (centrées en  $E \approx \frac{U}{p}$ ). On trace aussi la densité d'états intégrée  $N(E)$  qui montre que chaque sous-bande contient  $L$  états.

---

<sup>5</sup>ces derniers ont une projection nulle sur les états  $|ii\rangle$ .

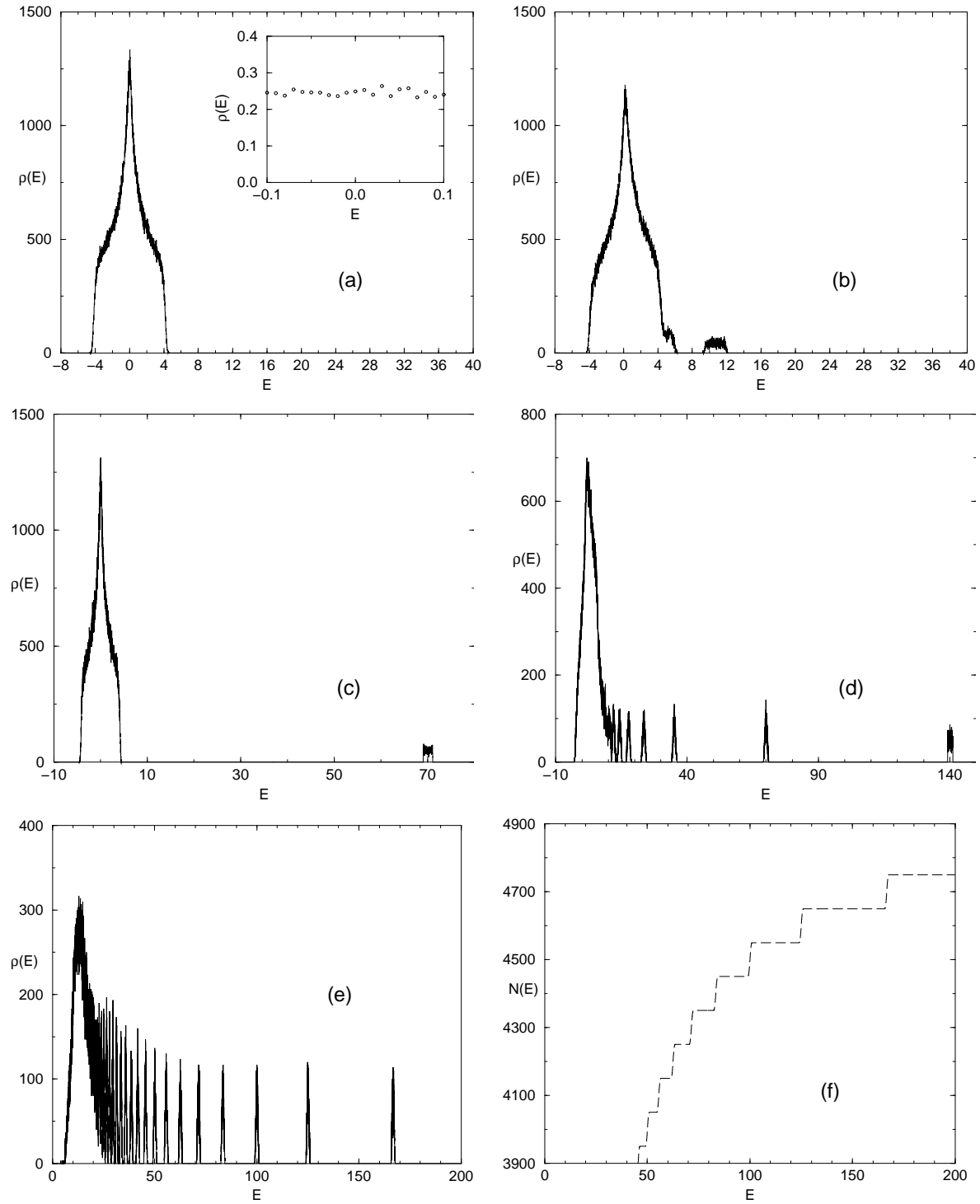


FIG. 7.1: Densité d'états  $\rho(E)$ , moyennée sur les différentes réalisations du désordre, pour un anneau de  $L = 100$  sites. Le désordre est tel que  $L = L_1 = 100$ . (a) ( $U = 0$ ) Bande des états libres (2FP) ; dans l'insert on trace la densité moyenne en milieu de bande  $E \approx 0$  (normalisée à 1) ; (b) Coulomb ( $U = 5$ ) ; (c) Hubbard ( $U = 35$ ) La bande principale des  $L(L-1)/2$  états de "bosons de coeur dur" restent centrés autour de  $E = 0$  alors que les  $L$  états moléculaires sont centrés autour de  $E \approx 2U$ . Répulsion Coulombienne pour  $U = 70$  (d)  $U = 500$  (e) où chaque sous-bande est centrée autour de  $E \approx U/p$  avec  $p = 1, \dots, L/2$ . (f) Densité intégrée  $N(E)$  montrant que chaque sous-bande contient  $L$  états dans le cas d'une répulsion Coulombienne à ( $U = 500$ ).



# Chapitre 8

## Comparaison par étude numérique des interactions d'Hubbard et de Coulomb

---

Dans le chapitre précédent nous avons introduit le modèle (TIP). Nous nous intéressons, dans ce chapitre, à la différence entre les interactions de Hubbard et celles de Coulomb. Nous avons déjà vu que les états du problème tendaient vers des limites différentes pour Hubbard et Coulomb. On étudie ici, les éléments de matrices d'interaction des deux répulsions et nous comparons aussi leurs propriétés spectrales. L'analyse de ces différentes quantités montrera, que l'interaction Coulombienne conduit à une plus grande délocalisation des états que l'interaction d'Hubbard

### 8.1 Mélange des états à un corps

#### 8.1.1 Eléments de matrice d'interaction

Pour comparer les interactions de Hubbard et celles de Coulomb, on s'intéresse aux couplages présentés dans le paragraphe (7.1.2). On définit alors le couplage  $Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(p)$  apporté par le terme de portée  $p$  dans le hamiltonien de Coulomb<sup>1</sup> par :

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(0) &= U \sum_{n=1}^L \alpha^*(n) \beta^*(n) \gamma(n) \delta(n) \\ Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(p) &= U \sum_{n=1}^L \frac{\alpha^*(n) \beta^*(n+p) \gamma(n) \delta(n+p)}{|p|} + \text{permutations avec } p \neq 0 \end{aligned} \quad (8.1)$$

où les "*permutations*" sont des termes identiques au premier, à des permutations d'indice près :  $(\alpha \leftrightarrow \beta)$  puis  $(\gamma \leftrightarrow \delta)$  et enfin  $(\alpha \leftrightarrow \beta, \gamma \leftrightarrow \delta)$ .

On définit alors les éléments de matrice d'interaction  $\langle \alpha\beta | H_U | \gamma\delta \rangle$  dans la base 2FP à l'aide de

---

<sup>1</sup> $(\frac{U}{p})$

ces éléments de couplage. On nommera ainsi  $H_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$  les éléments de matrice pour l'interaction d'Hubbard et  $C_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$  pour l'interaction de Coulomb :

$$\begin{aligned}\langle\alpha\beta|H_U^H|\gamma\delta\rangle &= UH_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} = 4Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(0) \\ \langle\alpha\beta|H_U^C|\gamma\delta\rangle &= UC_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} = (4Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(0) + 2\sum_{p=1}^{L/2} Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(p))\end{aligned}\quad (8.2)$$

Ces éléments de matrice se calculent donc à l'aide de fonctions d'onde à un corps  $\alpha(i)$  obtenues numériquement. L'étude des éléments de matrice est intéressante puisque l'on en tire des informations sur le temps de vie des états 2FP lorsque l'on branche l'interaction. Ceci sera vu dans le paragraphe suivant (8.1.2). On en tire aussi des informations sur les propriétés spectrales du système qui seront étudiées dans la section suivante (8.2).

### Interaction d'Hubbard : $H_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$

En l'absence de désordre, les états à une particule sont de la forme  $\alpha(n) = (\exp ik_\alpha n)/\sqrt{L}$  et les éléments de matrice  $\langle\alpha\beta|H_U^H|\gamma\delta\rangle$  ne couplent que les états 2FP ayant la même impulsion  $K = K_{\alpha\beta} = k_\alpha + k_\beta = K_{\gamma\delta}$ . Une étude plus complète de la matrice d'interaction dans le cas sans désordre ( $L_1 = \infty$ ) sera faite dans le paragraphe (8.2.2) où l'on considérera un sous-espace d'impulsion  $K$  donné. On a ainsi :

$$H_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} \xrightarrow{L_1 \rightarrow \infty} \frac{4}{L} \delta_{K_{\alpha\beta}, K_{\gamma\delta}} \quad (8.3)$$

En présence de désordre, l'impulsion n'est plus un bon nombre quantique. On trace, dans la figure suivante (figure (8.1) à gauche), la valeur absolue de l'amplitude des éléments de matrice  $|H_{\alpha\alpha}^{\gamma\delta}|$  dans le plan<sup>2</sup> ( $|\gamma\rangle, |\delta\rangle$ ). L'état à un corps  $|\alpha\rangle$  est pris en milieu de bande ( $\epsilon_\alpha \approx 0$ ). On voit que, en dehors de la diagonale principale<sup>3</sup> ( $\gamma = \delta$ ), les couplages les plus importants sont répartis uniformément sans structure apparente. Une étude plus poussée [151] montre que les états couplés ne sont pas forcément proches en énergie, et que la distribution des éléments  $H_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$  est multifractale. Cette étude montre aussi que la densité des états couplés par l'interaction  $\rho_2^{eff}$  dépend de la dimension fractale de la matrice d'interaction. On a ainsi dans un domaine de localisation  $L_1$  :  $\rho_2^{eff}(L_1) \propto L_1^{-1.35}$ , pour un état  $|\alpha\alpha\rangle$  en milieu de bande [151].

### interaction de Coulomb : $C_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$

En l'absence de désordre les éléments de matrice  $\langle\alpha\beta|H_U^C|\gamma\delta\rangle$  ne couplent que les états 2FP ayant la même impulsion  $K$ , comme dans le cas d'Hubbard. Mais à l'intérieur d'un bloc à  $K$  fixé, contrairement au cas d'Hubbard, tous les éléments ne sont pas égaux. La matrice devient

<sup>2</sup> Les états  $|\gamma\rangle$  (et  $|\delta\rangle$ ) sont rangés par ordre croissant d'énergie  $\epsilon_\gamma$

<sup>3</sup> Dans notre cas, la matrice hamiltonnienne est symétrique et réelle, les valeurs et les vecteurs propres sont donc réels. Les différents termes dans la somme définissant  $H_{\alpha\alpha}^{\gamma\gamma}$  sont donc tous positifs et ces éléments de matrice ont donc une amplitude supérieure aux autres éléments de matrice où le signe des termes n'est pas fixé

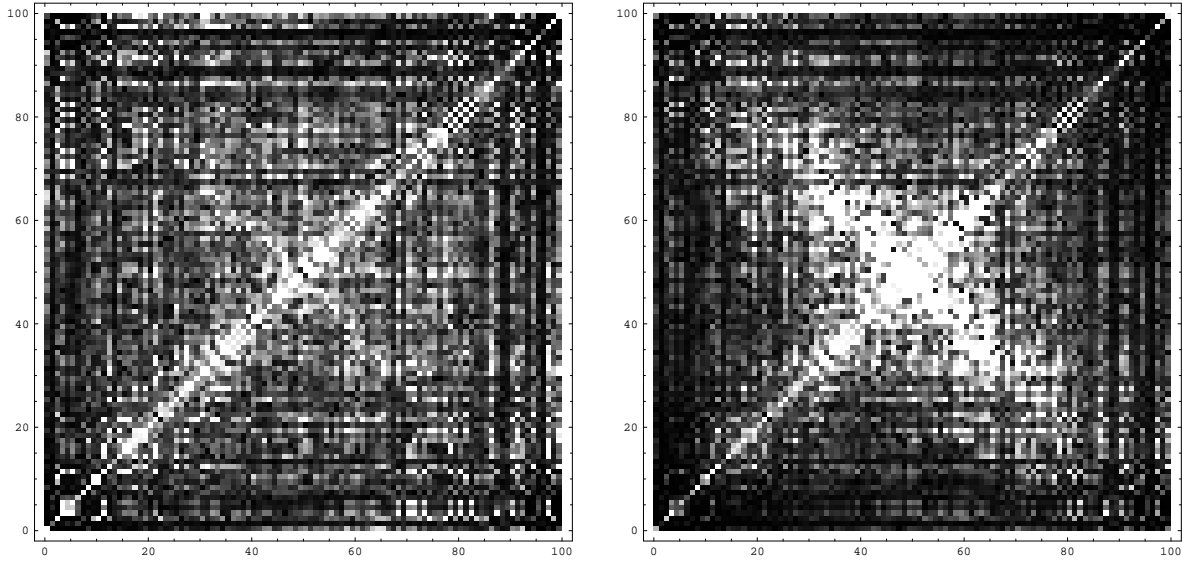


FIG. 8.1: Valeur absolue des éléments de matrices d'interactions couplant un état donné  $|\alpha\alpha\rangle$  (d'énergie  $\epsilon_\alpha \approx 0$ ) aux  $L^2$  états  $|\gamma\delta\rangle$  (les figures sont symétriques par rapport à la diagonale principale) pour un échantillon typique avec  $L = 2L_1 = 100$ . figure de gauche : Hubbard  $|H_{\alpha\alpha}^{\gamma\delta}|$ ; figure de droite : Coulomb  $|C_{\alpha\alpha}^{\gamma\delta}|$ . Les  $L^2$  valeurs absolues sont données dans le plan  $(|\gamma\rangle, |\delta\rangle)$ , où les états à une particule sont rangés par ordre croissant d'énergie. L'échelle des amplitudes est linéaire en couleur : les points blancs correspondent aux maxima et les noirs aux minima.

plus complexe (voir(8.2.2)) :

$$C_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} \xrightarrow{L_1 \rightarrow \infty} \frac{4}{L} \delta_{K_{\alpha\beta}, K_{\gamma\delta}} \times (1 + \sum_{p=1}^{L/2} \frac{\exp -i[(k_\beta - k_\gamma)p]}{2p} + \text{permutations}) \quad (8.4)$$

En présence de désordre, on trace (figure (8.1) à droite) l'amplitude en valeur absolue des éléments de matrice  $|C_{\alpha\alpha}^{\gamma\delta}|$  dans le plan  $(|\gamma\rangle, |\delta\rangle)$  (pour un état  $|\alpha\rangle$  en milieu de bande ( $\epsilon_\alpha \approx 0$ )). On observe une structure différente de celle d'Hubbard. Les couplages les plus forts sont disposés sur les deux diagonales principales et forment une croix. La structure multifractale disparaît donc avec une interaction de Coulomb. La première diagonale est formée par les états  $\gamma = \delta$ , comme dans le cas Hubbard. La deuxième diagonale est formée par les états  $|\gamma\delta\rangle$  ayant une énergie proche de celle de l'état initial  $E_{\gamma\delta} \approx E_{\alpha\alpha}$ .

Après une moyenne sur le désordre, la figure (8.2) confirme que seuls  $L$  états (les plus proches en énergie ( $\Delta E \leq \Delta_2 L/2$ )) se couplent fortement à un état considéré. L'amplitude

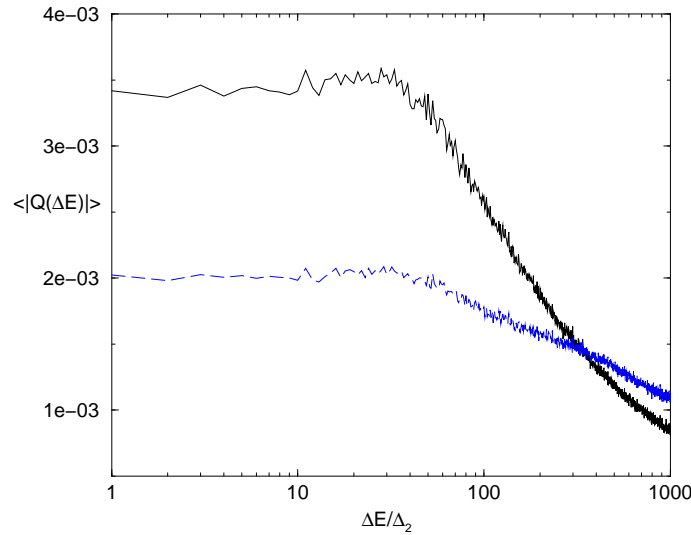


FIG. 8.2: Moyennes sur le désordre des valeurs absolues des amplitudes :  $\langle |Q(\Delta E)| \rangle = \langle |H_{\alpha\alpha}^{\gamma\delta}(\Delta E)| \rangle$  (tirets) et  $\langle |Q(\Delta E)| \rangle = \langle |C_{\alpha\alpha}^{\gamma\delta}(\Delta E)| \rangle$  (ligne continue) des éléments de matrice couplant des états 2FP séparés par une énergie  $\Delta E = |E_{\alpha\alpha} - E_{\gamma\delta}|$  (en unité d'espace moyen entre niveau (2FP)  $\Delta_2$ ) pour  $L = 2L_1 = 100$ .

des éléments de matrice diminue ensuite quand  $\Delta E$  augmente. Pour Hubbard, la décroissance est moins forte et on a un couplage à peu près uniforme après moyennage sur le désordre<sup>4</sup>.

### 8.1.2 Signatures de la différence de densité des états couplés $\rho_2$ entre Hubbard et Coulomb

#### Sur le temps de vie : $\Gamma^{-1}$

On a vu dans le paragraphe précédent que, pour une interaction Coulombienne, les éléments de matrice dominants sont ceux qui couplent des états proches en énergie. On peut donc raisonnablement estimer que la densité des états couplés en milieu de bande est égale à la densité d'états en milieu de bande. La largeur de la bande sans interaction étant  $B = 8t + W$  et le nombre d'états dans la bande  $N_{Ft} = \frac{L(L+1)}{2}$ , une approximation de la densité est  $\rho(E) \approx N_{Ft}/B$ . La densité varie donc en  $L^2$ , donc dans une boîte de taille  $L_1$  on a :  $\rho_2(L_1) \approx L_1^2$ . Dans le cas d'une interaction d'Hubbard, les couplages dans un domaine de localisation ne sont pas uniformes. Il existe une structure multifractale qui conduit à une densité effective d'états couplés<sup>5</sup> qui est réduite [151] :  $\rho_2^{eff}(L_1) \approx L_1^{1.35}$ .

Cette différence dans les couplages entraîne une différence de comportement pour le système. On commence par le constater sur l'inverse du temps de vie  $\Gamma_{\alpha\beta}$  d'un état 2FP  $|\alpha\beta\rangle$ . Ce dernier est l'élargissement spectral de cet état lorsque l'on branche l'interaction. Estimons  $\Gamma_{\alpha\beta}$  pour

<sup>4</sup>la moyenne sur le désordre, efface la structure multifractale visible sur un échantillon.

<sup>5</sup>On a en fait deux densités effectives, pour les états  $|\alpha\alpha\rangle$  on a la densité  $\approx L_1^{1.35}$  et pour les états  $|\alpha\beta\rangle$  on a une densité  $\approx L_1^{1.75}$



les interactions d'Hubbard et de Coulomb : si dans un domaine de localisation  $L_1$  on considère que les fonctions d'onde à une-particule sont données par la théorie des matrices aléatoires<sup>6</sup>, les éléments de matrice ont le comportement suivant :  $|\langle \alpha\beta | H_U | \gamma\delta \rangle|^2 \propto U^2/L_1^3$ . On en tire alors une estimation pour  $\Gamma_{\alpha\beta}$  à l'aide de la règle d'or de Fermi :

$$\Gamma_{\alpha\beta}(L = L_1) \propto |\langle \alpha\beta | H_U | \gamma\delta \rangle|^2 \rho_2(L_1) \propto L_1^{-1} \text{ pour Coulomb}$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}(L = L_1) \propto |\langle \alpha\beta | H_U | \gamma\delta \rangle|^2 \rho_2^{eff}(L_1) \propto L_1^{-1.65} \text{ pour Hubbard} \quad (8.5)$$

$$(8.6)$$

Ces prédictions ont été testées numériquement dans la figure (8.3) pour une chaîne de longueur  $L = 420$  pour différents désordres<sup>7</sup>  $L_1$ . Pour  $L_1 < L$  on obtient  $\Gamma_{\alpha\alpha} \propto L_1^{-1.65}$  pour Hubbard et  $\Gamma_{\alpha\alpha} \propto L_1^{-1.1}$  pour Coulomb, ce qui est proche des valeurs estimées. Pour  $L_1 > L$  les dépendances saturent, on tend vers la limite sans désordre. On passe en revue d'autres

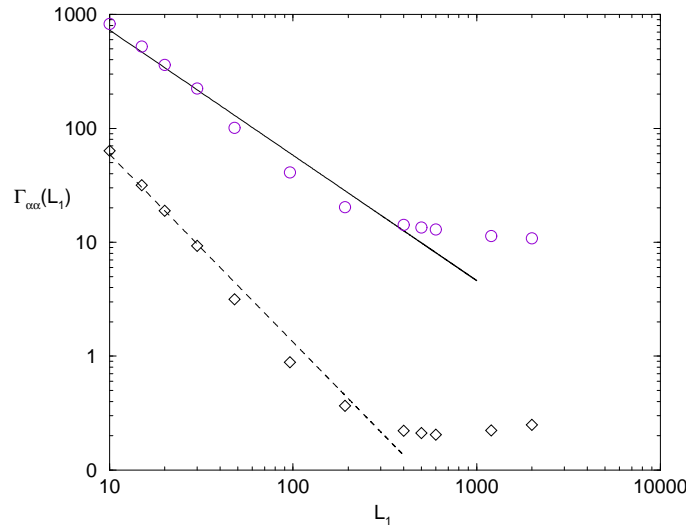


FIG. 8.3: Inverse du temps de vie  $\Gamma_{\alpha\alpha}(L_1)$  d'un état 2FP  $|\alpha\alpha\rangle$  Inverse du temps de vie  $\Gamma_{\alpha\alpha}(L_1)$  d'un état 2FP  $|\alpha\alpha\rangle$  avec  $\epsilon_\alpha \approx 0$  pour les interactions d'Hubbard ( $\diamond$ ) et Coulomb ( $\circ$ ) respectivement.  $L = 420$ . Les tirets correspondent à  $\Gamma_{\alpha\alpha} \propto L_1^{-1.65}$  et la ligne continue à  $\Gamma_{\alpha\alpha} \propto L_1^{-1.1}$ .

conséquences dues à la différence de densité d'états couplés dans les paragraphes suivants.

### Sur la longueur de localisation à deux particules $L_2$

Shepelyansky [130] a démontré que certains états à deux-particules, d'un système désordonné, ont une longueur de localisation  $L_2$  plus importante que la longueur à une-particule  $L_1$ . Si de plus, seuls les états proches en énergie sont bien couplés ( $\rho_2(L_1) \propto L_1^2$ ), alors le facteur d'augmentation  $L_2/L_1$  est proportionnel à  $L_1$ . C'est le cas pour Coulomb. Dans le cas

<sup>6</sup> Soit  $Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} \approx \pm U L_1^{-\frac{3}{2}}$

<sup>7</sup> A 1d, la longueur de localisation et le désordre  $W$  sont liés par une relation donnée au paragraphe(1.3.3).

de l'interaction d'Hubbard, la densité d'états couplés est inférieure ( $\rho_2^{eff} \approx L_1^{1.75}$ ). On s'attend alors à ce que l'effet de délocalisation soit plus petit [107, 152]. On aura pour Coulomb et Hubbard :

$$\begin{aligned} \frac{L_2}{L_1} &\propto \frac{\Gamma}{\Delta_2} \propto | < \alpha \beta | H_U^C | \gamma \delta > |^2 (\rho_2(L_1))^2 && \propto L_1 \text{ pour Coulomb} \\ \frac{L_2}{L_1} &\propto | < \alpha \beta | H_U^H | \gamma \delta > |^2 (\rho_2^{eff}(L_1))^2 && \propto \sqrt{L_1} \text{ pour Hubbard} \end{aligned} \quad (8.7)$$

### Sur la diffusion des états TIP

La différence dans la densité d'état couplés des deux interactions doit aussi se ressentir sur la dynamique du TIP. La propagation des deux particules peut-être paramétrée par leur position respective ( $x_1(t), x_2(t)$ ) au cours du temps. On peut aussi la paramétrer par la position du centre de masse  $R(t) = (x_1(t) + x_2(t))/2$  et la distance relative  $\rho(t) = x_1(t) - x_2(t)$ . A une dimension, le libre parcours moyen  $l$  est de l'ordre de la longueur de localisation. Pour des longueurs  $L$  telles que  $L < L_1$ , on a donc un mouvement balistique du système TIP et  $R(t) \propto t$  [42]. En l'absence d'interaction, le système ne se propage pas plus loin que  $L_1$  et on a une saturation de  $R(t)$  à la distance  $L_1$ . En présence d'interaction, on constate une diffusion assistée par les interactions, sur des longueurs comprises entre  $L_1 < L < L_2$ . Ainsi pour une densité  $\rho_2$  (Coulomb), le centre de masse évolue suivant<sup>8</sup>  $R(t) \approx \sqrt{D(t) \cdot t}$  qui est caractéristique d'une diffusion [54]. Pour une densité de couplage plus faible en  $\rho_2^{eff}$  (Hubbard), on assiste [42] à une propagation plus lente avec  $R(t) \propto \log(t)$ .

## 8.2 Propriété spectrale et délocalisation spatiale

L'interaction de Coulomb, en couplant mieux les états proches en énergie, doit augmenter la délocalisation par rapport au cas d'une interaction d'Hubbard. Pour le vérifier, on va comparer les propriétés spectrales de systèmes avec les deux types d'interaction. Des études précédentes ont montré, pour des états en milieu de bande, qu'avec l'interaction d'Hubbard seule une statistique de semi-Poisson est atteinte pour des valeurs intermédiaires du paramètre  $U/t$  [152]. Sachant que pour l'interaction de Coulomb, la bande principale se décompose en sous-bandes à forte interaction, on étudiera les états de la dernière sous-bande autour de l'énergie  $E \approx 2U/L$ . Ces états sont en milieu de bande pour des interactions modérées (voir figure (7.1)). Le paramètre sans dimension mesurant la force des interactions est  $U/t$  dans le cas d'Hubbard. Dans le cas Coulombien, on voudrait prendre le paramètre  $r_s$ , toutefois ce dernier ne reflète plus la force des interactions en milieu de bande. On reprend ici l'argument du paragraphe (1.1.1) dans le cas où l'état est en milieu de bande : si on considère une particule dans un état excité au milieu de spectre alors son énergie cinétique<sup>9</sup>  $E_K \propto \frac{\hbar^2 d}{2m^*} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ . Le rapport de

<sup>8</sup>  $D(t)$  est constant à des corrections en  $\log(t)$  près.

<sup>9</sup>  $k_i \propto \frac{\pi}{a}$  avec  $a$  l'unité de longueur

l'énergie d'interaction sur l'énergie cinétique n'est donc plus proportionnel à  $r_s = b/a_B^*$ .

$$\frac{E_U}{E_K} \propto \frac{Z}{d\pi^3} \left( \frac{a^2}{b \cdot a_B^*} \right) \quad (8.8)$$

On introduit donc ici un autre paramètre  $\tilde{r}_s$ , qui est le rapport de l'énergie d'interaction sur l'énergie cinétique. Dans notre modèle sur réseau on aura en milieu de bande :  $E_K \approx 2t(1 - \cos \pi) \approx 4t$  et pour énergie d'interaction  $E_U = 2U/L$ . Le nouveau paramètre sera donc :

$$\tilde{r}_s = \frac{E_U}{E_K} = \frac{U}{2tL} \quad (8.9)$$

### 8.2.1 Bases préférentielles.

On a vu dans le paragraphe (7.2) qu'en augmentant l'interaction progressivement : les états propres évoluent des états libres (2FP  $|\alpha\beta\rangle$ ) vers les états moléculaires ( $|ij\rangle$ ) si l'interaction est Coulombienne. Si l'interaction est celle d'Hubbard, les états évoluent vers des états "bosons de coeur dur" ( $|\widetilde{\alpha\beta}\rangle$ ) (voir 7.2.2). On note  $|\psi\rangle$  un état propre du système avec interaction (TIP).

On dira que la base des états (2FP) est préférentielle, si la description de l'état  $|\psi\rangle$  nécessite un nombre moins grand d'états dans cette base que dans la base des états moléculaires. On définit alors l'interaction critique  $U_c$  (et le paramètre  $\tilde{r}_s^c$  correspondant) comme l'interaction pour laquelle la base des états (2FP) cesse d'être préférentielle par rapport à la base des états moléculaires.

Pour une interaction d'Hubbard, il est détaillé dans la référence [152], comment le système TIP passe de la base libre (2FP) à la base des bosons de coeur dur quand  $U \rightarrow \infty$ . Dans ce cas, il existe une relation de dualité exacte qui lie les éléments de matrice d'interaction<sup>10</sup> couplant les états 2FP aux éléments de matrice d'énergie cinétique<sup>11</sup> couplant les états bosons de coeur dur. On identifie, dans ce cas,  $U_c$  comme étant le point fixe de la transformation de dualité. On peut alors calculer l'interaction critique en milieu de spectre :  $U_c = (24)^{1/4}t/2$ .

Pour une interaction de type Coulomb, la relation de dualité ne s'étend pas. On étudie alors numériquement le rapport de participation  $\chi_B$  qui mesure le nombre d'états nécessaires pour décrire un état  $|\psi\rangle$  dans la base B. On définit alors pour les différentes interactions les rapports de participation associés aux différentes bases :

$$\begin{aligned} \chi_0 &= \left( \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha\beta | \Psi \rangle|^4 \right)^{-1} \\ \chi_\infty^C &= \left( \sum_{ij} |\langle ij | \Psi \rangle|^4 \right)^{-1} \text{ pour une interaction Coulombienne} \\ \chi_\infty^H &= \left( \sum_{\widetilde{\alpha\beta}} |\langle \widetilde{\alpha\beta} | \Psi \rangle|^4 \right)^{-1} \text{ pour une interaction d'Hubbard} \end{aligned} \quad (8.10)$$

Dans la figure (8.4), on trace  $\chi$  pour différentes tailles : le cross-over apparaît pour une valeur caractéristique du paramètre  $\tilde{r}_s \sim 1.4$ . Dans le cas Hubbard, le cross-over redonne bien

---

<sup>10</sup>  $|Q| \propto \frac{U}{t}$   
<sup>11</sup>  $|T| \propto \frac{t}{U}$

la valeur attendue  $U_c$ , déduite de la relation de dualité. On montre ainsi que  $\tilde{r}_s$  est bien le paramètre pertinent du problème.

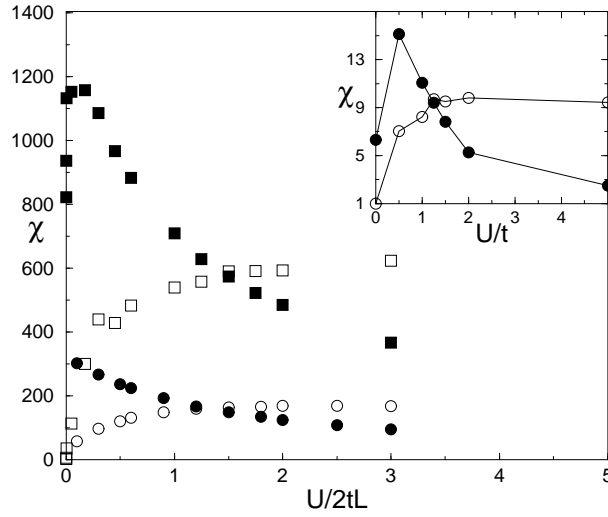


FIG. 8.4: rapport de participation  $\chi$  pour les tailles  $L = 50$ (cercles) et  $L = 100$ (carrés). Les symboles pleins sont pour  $\chi_{\infty}^{C,H}$  et les vides pour  $\chi_0$ . Dans la figure principale : on trace  $\chi$  pour des états d'énergies  $\approx 2U/L$  en fonction du rapport  $U/(2tL)$  pour l'interaction de Coulomb. Dans l'insert :  $\chi$  pour la répulsion d'Hubbard pour des états autour de  $E \approx 0$  en fonction du rapport  $U/t$ .

### 8.2.2 Statistique de niveaux

On a vu dans le chapitre(3.3), que la statistique rend compte en partie de la délocalisation des fonctions d'onde. On s'intéresse donc à l'évolution de la statistique spectrale, en fonction de la portée des interactions.

#### Effet de la portée de l'interaction sur la statistique de niveaux

On étudie des systèmes avec des interactions ayant des portées différentes. On varie la portée en introduisant une coupure brutale dans le hamiltonien d'interaction Coulombienne. Ainsi une interaction de portée  $p$  aura pour hamiltonien :

$$H_U^C = U \sum_i n_i(n_i - 1) + \frac{U}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ 0 < |i-j| \leq p}}^L \frac{n_i n_j}{|i - j|} \quad (8.11)$$

Comme le montre la figure (8.5), en variant la portée  $p$  la répulsion de niveau augmente. Ainsi à une interaction fixée, on peut passer d'un spectre poissonien avec une interaction locale à un spectre Wigner-Dyson pour une interaction Coulombienne.

On peut suivre grâce au paramètre  $\eta$  l'évolution de la statistique avec la portée. On s'aperçoit avec la figure (8.6) que l'interaction sur site est singulière puisqu'en lui rajoutant une

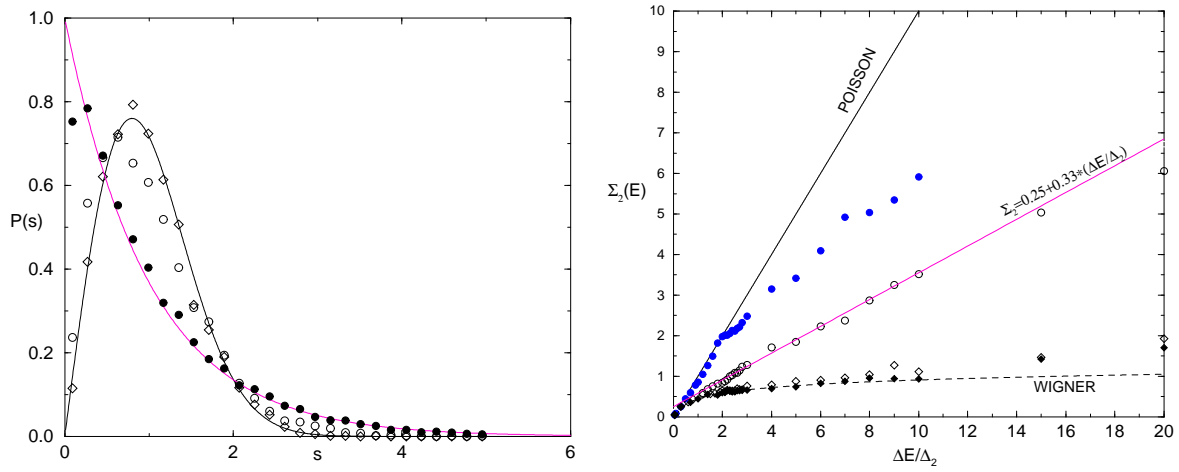


FIG. 8.5: A gauche : Distributions des écarts de niveaux  $P(s)$  pour les interactions d'Hubbard (●) et de Coulomb (◊) à  $U = 70$  et  $L = L_1 = 50$ . Les symboles (o) correspondent à une portée  $p = 1$  (sur site+plus proches voisins). Les lignes continues correspondent aux distributions  $P_P(s)$  et  $P_W(s)$ . A droite :  $\Sigma_2$  en fonction de l'intervalle en énergie  $E$  exprimée en unité d'espacement de niveau TIP  $\Delta_2$  (les symboles sont les mêmes que pour  $P(s)$  exceptés les diamants pleins (Coulomb à  $U = 100$  et  $L = L_1 = 100$ )).

interaction entre plus proches voisins, on constate un saut dans la statistique. L'augmentation de la portée  $p$  donne ensuite une variation régulière du paramètre  $\eta$ . La singularité de l'interaction sur site se voit déjà dans la figure (8.5) où pour  $p = 1$  on constate que le spectre est corrélé puisque l'on est loin de la statistique de Poisson.

### Evolution de la statistique de niveaux avec le paramètre $\tilde{r}_s$

On mesure l'évolution de la statistique, en fonction du paramètre  $\tilde{r}_s$ , à l'aide du paramètre  $\eta$ . On rappelle que :

$$\eta(P, \tilde{r}_s) = \frac{\int_0^{s_0} ds [P(s) - P_W(s)]}{\int_0^{s_0} ds [P_P(s) - P_W(s)]} \quad (8.12)$$

avec  $s_0 = 0.4729$  l'abscisse de la première intersection entre les statistiques de Poisson  $P_P(s)$  et de Wigner  $P_W(s)$ .

On a tracé dans la figure (8.7) l'évolution de  $\eta$  pour les interactions d'Hubbard et Coulomb pour différentes tailles et en fonction de leur paramètre  $\tilde{r}_s$  respectif. L'analyse de la figure met en évidence trois régimes de variation de la statistique. Elle confirme que l'interaction Coulombienne conduit à un spectre plus corrélé puisque la statistique de Wigner est atteinte pour des interactions intermédiaires. On décrit plus précisément les trois régimes dans les paragraphes qui suivent.

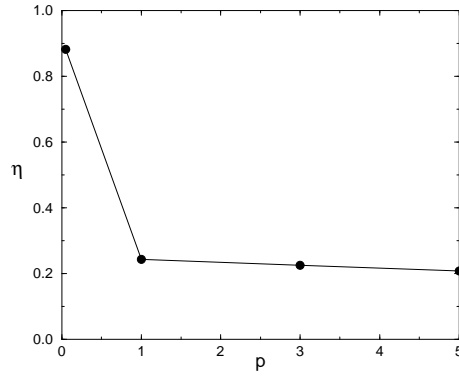


FIG. 8.6: Paramètre  $\eta$  pour des états autour de  $E \approx 0$  en fonction de la portée  $p$  des interactions.

### régime de Rabi : $U < U^*$

Dans un régime où l'interaction est perturbative et l'amplitude des éléments de matrices  $U\bar{Q}$  inférieure à l'espacement entre niveau  $\Delta_2$ , seuls les états consécutifs en énergie ont des couplages non-négligeables [154,155]. On a donc un problème effectif d'ensemble de systèmes à deux niveaux faiblement couplés. Le couplage dû aux interactions induit donc des oscillations de Rabi entre les états 2FP consécutifs en énergie. La fréquence de ces oscillations est donnée par la valeur absolue de l'élément de matrice d'interaction<sup>12</sup> [154,155].

On appelle  $U^*$  la force de l'interaction pour laquelle l'élément de matrice d'interaction entre niveaux consécutifs devient de l'ordre de leur espacement  $\Delta_2$ . Tant que  $U < U^*$  on a le régime de Rabi. Quand  $U$  atteint  $U^*$ , on a une transition de ce régime perturbatif vers un régime où l'élargissement de niveaux des états 2FP est donné par une règle d'or de Fermi effective [154,155].

$U^*$  vérifie l'équation  $U\bar{Q} = \Delta_2$ . On peut donc, à l'aide de cette équation, estimer  $U^*$  dans le cas particulier  $L = 100$  et pour des états en milieu de bande. L'insert de la figure (7.1(a)) donne la densité d'états ( $\rho(E \approx 0) \approx 0.25$ ) des états 2FP en milieu de bande. On en déduit l'espacement moyen entre deux niveaux 2FP consécutifs :  $\Delta_2 = \left(\rho(E \approx 0) \frac{L(L+1)}{2}\right)^{-1} \approx 7.92 \times 10^{-4}$ . La distribution des éléments de matrice couplant deux niveaux 2FP consécutifs en milieu de bande est donnée dans la figure (8.8) pour des interactions d'Hubbard et Coulomb. Les distributions sont gaussiennes et leurs variances donnent les amplitudes typiques des éléments de matrice  $\bar{Q}$ . On en déduit alors  $U^*$  pour l'interaction Coulombienne et celle d'Hubbard : on obtient  $U_{Coul}^* = 0.08$  pour Coulomb soit en terme de facteur sans dimension  $\tilde{r}_s^* = \frac{U_{Coul}^*}{2tL} \approx 4.10^{-4}$  et pour Hubbard  $U_{Hub}^* = 0.2$ .

La figure (8.7) montre bien un changement de régime autour des valeurs de  $U^*$  attendues pour Coulomb et Hubbard.

### Autour du cross-over : $U^* < U < U_c$

Le changement de régime observé autour de  $U^*$  pour l'interaction de Coulomb et d'Hubbard

<sup>12</sup>Ainsi si  $|\alpha\beta\rangle$  et  $|\gamma\delta\rangle$  sont des niveaux consécutifs, la fréquence de Rabi associée est  $\frac{1}{\hbar}\langle\gamma\delta|\mathcal{U}|\alpha\beta\rangle$

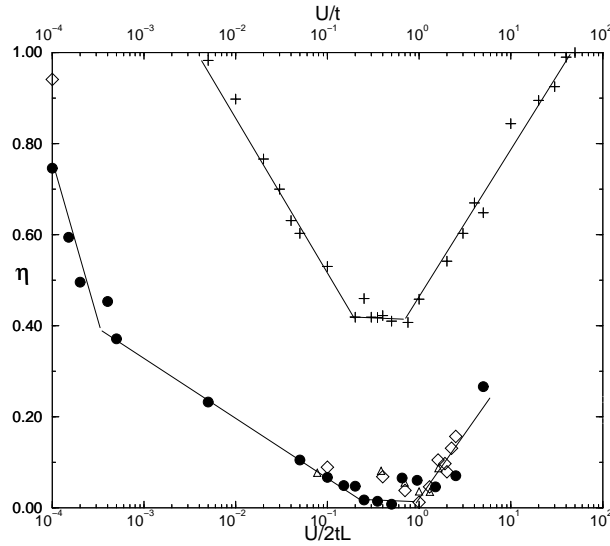


FIG. 8.7: Paramètre spectral  $\eta$  en fonction de  $U/t$  (Hubbard, échelle du haut) ou de  $U/(2tL)$  (Coulomb, échelle du bas) pour  $L = L_1$ . Interaction de Coulomb pour  $L = 100(\bullet)$ ,  $50(\diamond)$  et  $65(\triangle)$ . Interaction d'Hubbard pour  $L = 100(+)$ .

correspond à une valeur du paramètre  $\eta \approx 0.39$ . Cette valeur correspond à une distribution intermédiaire entre Poisson et Wigner. C'est par exemple la valeur associée à la distribution semi-Poisson  $P_{SP}(s)$  (voir (3.3)). La figure (8.7) montre que pour  $U^* < U < U_c$ , dans le cas d'une interaction d'Hubbard, la statistique atteint un maximum en rigidité qui est la statistique semi-Poisson [152]. On voit par contre que pour une interaction de Coulomb, le paramètre  $\eta$  continue à décroître jusqu'à atteindre la statistique de Wigner-Dyson autour de la valeur  $U_c$  (ou  $\tilde{r}_s^c$ ), caractéristique du cross-over entre bases préférentielles (voir (8.2.1)).

On peut expliquer la statistique semi-poisson pour Hubbard par un argument sans désordre. En effet en l'absence de désordre l'impulsion  $K$  est un bon nombre quantique. Dans un sous-espace à  $K$  fixé, les énergies propres du système TIP sont données par l'équation<sup>13</sup> :

$$\sum_{\gamma\delta} \frac{1}{E_n(K) - E_{\gamma\delta}} = \frac{L}{4U} \quad (8.13)$$

où  $E_{\gamma\delta} = 2 \cos k_\gamma + 2 \cos k_\delta$  et  $k_\gamma + k_\delta = K$ . Les états  $E_n(K)$  s'alternent avec les états  $E_{\gamma\delta}$  pour une valeur de  $U$  finie et s'identifient au  $E_{\gamma\delta}$  précédent et suivant dans les limites  $U \rightarrow 0$

<sup>13</sup>cette équation est obtenue par la résolution matricielle de l'équation de Schrödinger dans la base 2FP, où la matrice d'interaction est simple puisqu'elle ne contient que des 1 (voir [21]) :

$$\left( \begin{bmatrix} E_{\gamma_1\delta_1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & E_{\gamma_2\delta_2} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & E_{\gamma_{N_s}\delta_{N_s}} \end{bmatrix} + \frac{4U}{L} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 \end{bmatrix} \right) (\Psi) = E(\Psi)$$

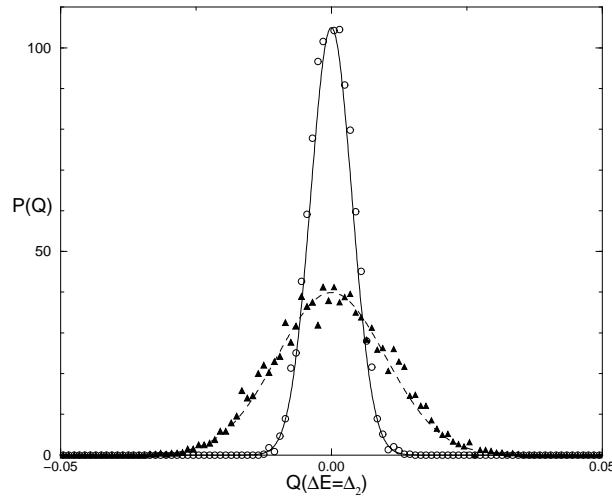


FIG. 8.8: Distribution  $P(Q)$  des éléments de matrice  $Q = H_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$  (Hubbard : cercles) et  $Q = C_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$  (Coulomb : triangles) couplant des états 2FP consécutifs (dont la séparation en énergie  $\approx \Delta_2$ ) pour  $L = L_1$ . Les distributions sont interpolées avec des courbes gaussiennes de variances  $\sigma^2 = 0.01^2$  (Coulomb, tirets) et  $\sigma^2 = 0.0038^2$  (Hubbard, ligne continue).

et  $U \rightarrow \infty$  (voir figure(8.9)). On peut estimer que pour  $U = U_c$ , quand on est à égale distance des bases à  $U = 0$  et  $U = \infty$ , les états  $E_n(K)$  se trouvent au milieu de deux états  $E_{\gamma\delta}$  consécutifs. La distribution des états (2FP) est Poissonnienne. Or la distribution, de niveaux situés au milieu de niveaux poissonniens, est par définition la distribution  $P_{SP}(s)$ . On doit donc avoir la distribution semi-poisson à  $U_c$  dans un sous-espace. Dans le cas Coulombien et sans désordre, la matrice d'interaction dans un sous-espace  $K$  est plus aléatoire<sup>14</sup>. On peut donc s'attendre à ce que la statistique se rapproche plus de Wigner-Dyson quand  $U$  augmente.

#### retour à la limite Poissonnienne : $U > U_c$

Pour Hubbard, au dessus de l'interaction  $U_c$  point fixe de la relation de dualité, les états du système TIP en milieu de spectre tendent vers les états "bosons de coeur dur" de la base  $U = \infty$ . Ces derniers ayant une statistique poissonnienne,  $\eta$  doit tendre vers 1 dans la limite  $U \rightarrow \infty$ . Pour l'interaction de Coulomb, dans la limite  $U \rightarrow \infty$ , les états du système TIP autour de l'énergie  $E \approx \frac{2U}{L}$  tendent vers les états moléculaires où les deux particules sont distantes de  $p = \frac{L}{2}$ . Les énergies de ces états  $E = \frac{U}{p} + W(v_i + v_{i+p})$  sont quasiment identiques à des termes de désordre près. L'amplitude du désordre sur les sites  $v_i$  étant tirée aléatoirement dans une boîte de largeur  $W$ , la différence d'énergie entre niveau possède une distribution poissonnienne. On doit donc aussi avoir dans ce cas  $\eta \rightarrow 1$  quand  $U \rightarrow \infty$ . Toutes ces constatations sont bien vérifiées sur la figure (8.7).

<sup>14</sup>les termes ne sont pas tous égaux à 1



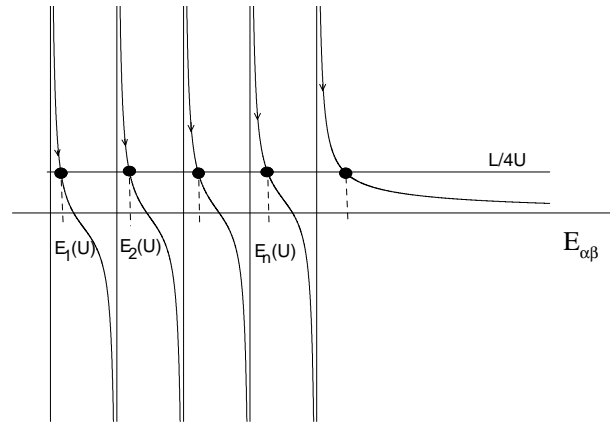


FIG. 8.9: Résolution graphique, dans un sous-espace d'impulsion donné, de l'équation aux valeurs propres (8.13). Les barres verticales correspondent aux énergies  $E_{\alpha\beta}$ . Les valeurs propres se trouvent à l'intersection avec la droite horizontale  $L/4U$ .

### 8.2.3 Délocalisation

Nous venons de voir qu'autour de la valeur de l'interaction  $\tilde{r}_s^c$ , où le système TIP a une délocalisation maximale sur les états des bases à ( $U = 0$ ) et ( $U = \infty$ ), la corrélation des niveaux est maximale. On atteint la statistique semi-Poisson dans le cas de l'interaction d'Hubbard et on atteint même la statistique de Wigner-Dyson avec l'interaction de Coulomb. On sait que la statistique de Wigner-Dyson est le signe d'une possible délocalisation spatiale. Nous allons donc mesurer la délocalisation, autour de  $U_c$ , des états  $|\Psi\rangle$  d'énergie  $E \approx \frac{2U}{L}$  pour l'interaction Coulombienne. Pour cette étude on considère la fonction de corrélation densité-densité<sup>15</sup>  $C(r) = \frac{1}{2} \sum_i \rho_i \rho_{i+r}$  dont on tire :

- le nombre de sites  $\xi = 2C(0)^{-1}$  occupés par l'état  $|\Psi\rangle$
- et le paramètre de cristallisation  $\gamma$ , qui pour un état liquide vaut 0 et pour une molécule vaut 1.

On trace ces deux paramètres dans la figure (8.10) :

On observe bien une corrélation entre cette figure et la figure (8.7) : on a une délocalisation spatiale maximale autour de la valeur  $\tilde{r}_s^c$  où le système TIP a une délocalisation spectrale maximale. Pour cette interaction les fonctions d'onde sont plus "liquides".

## 8.3 Conclusions

Nous avons étudié le problème le plus simple combinant la localisation et l'interaction à deux-corps. Nous avons constaté que la portée de l'interaction apportait de grandes différences :

- La première provient de l'étude des éléments de matrice qui montre que les états proches en énergie sont mieux couplés pour une interaction Coulombienne et qu'on retrouve ainsi la

<sup>15</sup>  $\rho_i = \langle \Psi | c_i^\dagger c_i | \Psi \rangle$

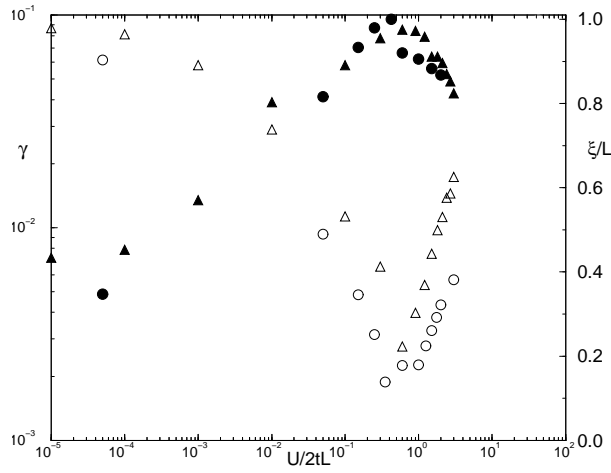


FIG. 8.10: paramètre de cristallisation  $\gamma$  (symboles vides et échelle de gauche) et fraction de sites occupés  $\xi/L$  (symboles pleins et échelle de droite) en fonction de  $U/(2tL)$  (interaction de Coulomb).  $L = L_1 = 50(\triangle)$  et  $L = L_1 = 100(o)$

prédiction originale de Shepelyansky  $L_2 \propto L_1^2$ .

- La deuxième se voit dans l'étude des statistiques spectrales. La statistique passe de Wigner-Dyson à une statistique intermédiaire lorsque l'on diminue progressivement la portée de l'interaction pour arriver à l'interaction d'Hubbard. On définit aussi trois limites. On a une limite de faible interaction dominée par la localisation, une limite de forte interaction dominée par l'accrochage des "molécules de Wigner" sur le désordre, et enfin entre ces deux limite se trouve un régime intermédiaire où les états sont le plus délocalisés sur la base des sites comme sur la base des états à un-corps et où on trouve une rigidité maximale pour le spectre. Ce régime se trouve à des valeurs autour de 1 pour les paramètres  $U/t$  (Hubbard) et  $\tilde{r}_s = U/2tL$  (Coulomb).

# CONCLUSION

---

En conclusion, nous résumons les motivations et les principaux résultats de ce travail : Cette thèse est motivée par des faits expérimentaux marquants, qui sont à l'origine d'un effort théorique récent et important visant à comprendre le rôle des interactions Coulombiennes dans des systèmes de basses dimensions très dilués. En effet, on observe une transition métal-isolant quantique à des températures faibles dans des gaz bidimensionnels d'électrons, alors que les théories actuelles prédisent l'absence de phase métallique sans interaction. Des études complémentaires sous champ magnétique parallèle ont aussi montré l'importance des spins des porteurs pour les propriétés de transport. Le fait d'introduire une interaction très faible dans les théories ne résout pas le problème puisque le système reste un isolant d'Anderson. De même à interaction très forte, le verre de Coulomb est aussi isolant. Il faut donc étudier la compétition entre le désordre et les interactions dans un domaine de valeurs intermédiaires du paramètre  $r_s$ .

Dans la partie (II) de cette thèse, nous avons exposé comment traiter le terme d'énergie cinétique en perturbation pour un modèle sur réseau afin d'obtenir des développements en puissance de  $(t/U)$  des observables. Nous avons ainsi étudié le courant permanent et obtenu que les contributions dominantes du courant longitudinal varient en  $(t^{L_x}/U^{L_x-1})$ . Nous avons obtenu la dépendance du courant transverse en flux dont l'amplitude varie en  $(t^{L_x+L_y}/U^{L_x+L_y-1})$ . Cette décroissance étant plus rapide que celle du courant longitudinal seul ce dernier subsiste à très forte interaction. On a donc un alignement des courants lorsque l'on augmente l'interaction comme cela avait été constaté dans des études numériques antérieures. Nous avons aussi obtenu dans le cas sans spin, une règle simple donnant le signe du courant à forte interaction indépendamment de la réalisation du désordre.

Nous avons étudié numériquement les propriétés de magnétisme et de délocalisation de l'état fondamental d'un système de quatre électrons. Nous avons observé une délocalisation spatiale pour les valeurs du paramètre  $r_s$  auxquelles est observée la transition métal-isolant. Les signatures magnétiques de la transition, qui sont la magnétorésistance, le déplacement des seuils critiques et le magnétisme de spin, sont aussi reproduites. Nous suggérons que le modèle étudié incluant l'interaction Coulombienne suffit à expliquer la transition observée. Cette transition

ne serait alors que la fusion d'un cristal de Wigner désordonné.

L'étude de quantités variées, comme les courants permanents, la fonction de corrélation densité-densité ou les statistiques spectrales, mettent en évidence deux seuils distincts  $r_s^f$  et  $r_s^w$ . Ces seuils définissent alors trois régimes qui sont : le verre de Fermi, le cristal de Wigner désordonné et un régime intermédiaire entre les deux précédent. Nous avons exploré la structure de cet état intermédiaire et montré que ce dernier possède à la fois des propriétés solide et liquide compatibles avec un état supersolide d'Andreev et Lifshitz.

Dans la partie (III) nous avons étudié le modèle minimal permettant de prendre en compte l'interaction et le désordre : deux particules en interaction sur une chaîne désordonnée. Nous avons plus particulièrement étudié les différences entre une interaction locale et une interaction à longue portée. Nous avons ainsi montré que l'interaction à longue portée couple surtout les états du problème à un corps qui sont proches en énergie. Elle conduit aussi les états du système, pour des valeurs intermédiaires de la force des interactions, vers le chaos quantique et vers une plus grande délocalisation.

# Liste des publications

---

- Persistent currents for Coulomb interacting electrons on 2d disordered lattices : Sign and interaction dependence in the Wigner crystal regime. Franck Selva and Dietmar Weinmann ; Eur. Phys. J. B 18, 137-148 (2000).
- Coulomb repulsion versus Hubbard repulsion in a disordered chain. Franck Selva and Jean-Louis Pichard ; Eur. Phys. J. B 20, 441-449 (2001).
- Role of a parallel magnetic field upon a few correlated electrons trapped in  $2d$  mesoscopic disordered clusters. Franck Selva and Jean-Louis Pichard ; Eur. Phys. Lett. **55**, 518-524 (2001).
- From the Fermi Liquid Towards the Wigner Solid in Two Dimensions. Jean-Louis Pichard, Giuliano Benenti, Georgios Katomeris, Franck Selva and Xavier Waintal ; to appear in "Exotic states in Quantum Nanostructures" ed. S. Sarkar, Kluwer, Dordrecht.
- Mesoscopic Wigner crystallization in two dimensional lattice models. Jean-Louis Pichard, Georgios Katomeris ,and Franck Selva ; " Electronic Correlations : From Meso-to-Nano-Physics". Proceedings of the XXXVIth Rencontres de Moriond, edited by T. Martin and G. Montambaux, EDP-Sciences.
- Andreev-Lifshitz conjecture revisited for a few electrons on a square lattice I. Georgios Katomeris, Franck Selva and Jean-Louis Pichard ; submitted to Eur. Phys. J. B. (cond-mat/0206404)



# Bibliographie

---

- [1] E. ABRAHAMS, P W ANDERSON, D C LICCIARDELLO, et T V RAMAKRISHNAN. Scaling theory of localization : absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 673–676, 1979.
- [2] B. L. ALTSHULER, A. G. ARONOV, et P.A. LEE. Interaction Effects in disordered Fermi Systems in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 1288, 1980.
- [3] B. L. ALTSHULER et D. L. MASLOV. Theory of Metal-Insulator Transitions in Gated Semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 145–148, 1999.
- [4] B. L. ALTSHULER et B.D. SIMONS. Universalities : From Anderson Localization to Quantum Chaos. Dans E. AKKERMANS, G. MONTAMBAUX, J.-L. PICHARD, et J. ZINN-JUSTIN, éditeurs, *Mesoscopic Quantum Physics*, Les Houches LXI, pages 5–94. (North Holland, Amsterdam, 1994.
- [5] P W ANDERSON. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, **109**, 1492–1505, 1958.
- [6] P W ANDERSON. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions. *Phys. Rev.*, **115**, 2–13, 1959.
- [7] T. ANDO, A. B. FOWLER, et F. STERN. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, **54**, 437, 1982.
- [8] A. F. ANDREEV et I. M. LIFSHITZ. Quantum theory of defects in crystals. *Sov. Phys. JETP*, **29**, 1107–1113, 1969.
- [9] A AUERBACH. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer, 1994.
- [10] G. G. BATROUNI et R. T. SCALETTAR. Phase Separation in Supersolids. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 1599–1602, 2000.
- [11] V.M. BEDANOV, G.V. GADIYAK, et Y.E. LOZOVIK. *Phys. Lett. A*, **109**, 289, 1985.
- [12] D. BELITZ et T.R. KIRKPATRICK. *Phys. Rev. B*, **58**, 8214, 1998.
- [13] G. BENENTI, G. CALDARA, et D.L. SHEPELYANSKY. Spin Polarized Ground State for Interacting Electrons in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 5333, 2001.

- [14] G. BENENTI, X. WAIN TAL, et J.-L. PICHARD. A new quantum phase between the Fermi glass and the Wigner crystal in two dimension. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 1826–1829, 1999.
- [15] G. BENENTI, X. WAIN TAL, et J.-L. PICHARD. Signatures of an intermediate 2d Coulomb phase at low temperature. *Europhys. Lett.*, **51**, 89, 2000.
- [16] R. BERKOVITS et Y. AVISHAI. *Solid State Comm.*, **93**, 301, 1995.
- [17] R. BERKOVITS et Y. AVISHAI. Localization in Fock Space : A Finite-Energy Scaling Hypothesis for Many-Particle Excitation Statistics. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 568–571, 1998.
- [18] R. BERKOVITS et Y. AVISHAI. Plastic flow of persistent currents in two-dimensional strongly interacting systems. *Phys. Rev. B*, **57**, R15076–R15079, 1998.
- [19] B. BERNU, L. CANDIDO, et DM CEPERLEY. Exchange frequencies in the 2D Wigner crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 870–873, 2001.
- [20] O. BOHIGAS, M.J. GIANNONI, et C. SCHMIT. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1, 1984.
- [21] A. BOHR et B. R. MOTTELSON. *Nuclear Structure*. Benjamin, New-York, 1969. Vol. 1, Appendix 2-D.
- [22] L. BONSALL et A.A. MARADUDIN. Some static and dynamical properties of a two-dimensional Wigner crystal. *Phys. Rev. B*, **15**, 1959–1973, 1977.
- [23] J.P. BOUCHAUD et C. LHUILLIER. A new variational Description of liquid  $^3\text{He}$  : The Superfluid Glass. *Europhys. Lett.*, **3**, 1273–1280, 1987.
- [24] H. BOUCHIAT et G. MONTAMBAUX. Persistent current in mesoscopic rings :ensemble averages and half-flux-quantum periodicity. *J. Phys. Fr.*, **50**, 2695–2707, 1989.
- [25] D. BRAUN, G. MONTAMBAUX, et M. PASCAUD. Boundary Conditions at the Mobility Edge. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 1062–1065, 1998.
- [26] T.A. BRODY, J. FLORES, J.B. FRENCH, P.A. MELLO, A. PANDEY, et S.S.M. WONG. Random-matrix physics : spectrum and strength fluctuations. *Rev. Mod. Phys.*, **53**, 386, 1981.
- [27] G. BRUNTHALER, A. PRINNZ, G. BAUER, V.M. PUDALOV, E.M. DIZUR, J. JAROSZYNSKI, et P. GLOD. Weak localization in the 2D metallic regime of Si-MOS. *Ann. Phys. (Leipzig)*, **8**, 579–584, 1999.
- [28] L.N. BULAEVSKII. Quasihomopolar electron levels in crystals and molecules. *Sov. Phys. JETP*, **24**, 154–160, 1967.
- [29] N. BYERS et N YANG. Theoretical Considerations concerning Quantized Magnetic Flux in Superconducting Cylinders. *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 46–49, 1961.
- [30] W.J. CARR. Energy, Specific Heat, and Magnetic Properties of the low density Electron Gas. *Phys. Rev.*, **122**, 1437–1446, 1961.
- [31] B. CASTAING et P. NOZIÈRES. Phase transitions of spin polarized  $^3\text{He}$  : a thermodynamical nuclear orientation technique. *J. Phys. Fr.*, **40**, 257, 1979.



- [32] C. CASTELLANI, C. DI CASTRO, M. GRILLI, et G. STRINATI. Thermoelectric power in disordered electronic systems near the Anderson transition. *Phys. Rev. B*, **37**, 6663, 1988.
- [33] C. CASTELLANI, C. DI CASTRO, et P.A. LEE. *Phys. Rev. B*, **57**, R9381, 1998.
- [34] D. CEPERLEY. Ground state of the fermion one-component plasma : A Monte Carlo study in the two and three dimension. *Phys. Rev. B*, **18**, 3126–31380., 1978.
- [35] D.M. CEPERLEY. Quantum Monte Carlo methods for fermions. Dans B. DOUÇOT et J. ZINN-JUSTIN, éditeurs, *strongly interacting fermions and high  $T_c$  superconductivity*, Les Houches, pages 427–453. Elsevier New York 1995, 1991.
- [36] FRANÇOISE CHATELIN. *Valeurs propres de matrices*. Masson, Paris Milan Barcelon Mexico, 1988.
- [37] S.T. CHUI et B. TANATAR. Impurity effect on the two dimensional electron fluid-solid transition in zero fluid. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 458–461, 1995.
- [38] P.T. COLERIDGE, A.S. SACHRAJDA, et P. ZAWADZKI. Weak localisation, interaction effects and the metallic phase in p-SiGe. *condmat/9912041*, 1999.
- [39] P.T. COLERIDGE, R. L. WILLIAMS, Y. FENG, et P. ZAWADZKI. Metal-insulator transition at  $B = 0$  in p-type SiGe. *Phys. Rev. B*, **56**, R12764–R12767, 1997.
- [40] R.S. CRANDALL et R. WILLIAMS. *Phys. Lett. A*, **34**, 404, 1971.
- [41] S. DAS SARMA et E.H. HWANG. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 5596, 2000.
- [42] S. DE TORO ARIAS, X. WAIN TAL, et J.-L. PICHARD. Two interacting particles in a disordered chain III : Dynamical aspects of the interplay disorder-interaction. *Phys. J. B.*, **10**, 149–158, 1999.
- [43] P.J.H. DENTENEER et N. SCALETTAR, R.T. TRIVEDI. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 4610, 1999.
- [44] G. DEVILLE, A. VALDES, E.Y. ANDREI, et F.I.B. WILLIAMS. Propagation of Shear in a Two-Dimensional Electron Solid. *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 588–591, 1984.
- [45] Y. DOBROSAVLJEVIC, E. ABRAHAMS, E. MIRANDA, et S. CHAKRAVARTY. Scaling theory of two-dimensional metal-insulator transitions. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 455–458, 1997.
- [46] Y. DOBROSAVLJEVIC, E. ABRAHAMS, et S. MIRANDA, E. CHAKRAVARTY. Scaling theory of two-dimensional metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 455–458, 1997.
- [47] V.T. DOLGOPOLOV, G.V. KRAVCHENKO, A.A. SHASHKIN, et S.V. KRAVCHENKO. *JETP Lett.*, **55**, 733, 1992.
- [48] S.C. DULTZ et H.W. JIANG. Thermodynamic Signature of a Two-Dimensional Metal-Insulator Transition. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 4689, 2000.
- [49] F.J. DYSON. Statistical Theory of the Energy Levels of complex systems. *J. Math. Phys.*, **3**, 140,157,166, 1962. série de trois articles référés par I,II et III.

- [50] F.J. DYSON et M.L. MEHTA. Statistical Theory of the Energy Levels of complex systems. *J. Math. Phys.*, **4**, 701,713, 1963. série de deux articles référés par IV,V.
- [51] F.F. FANG et P.J. STILES. Effect of a Tilted Magnetic Field on a Two-Dimensional Electron Gas. *Phys. Rev.*, **174**, 823–828, 1968.
- [52] A.M. FINKELSHTEIN. Influence of Coulomb interaction on the properties of disordered metals. *Sov. Phys.*, **57**, 97–108, 1983.
- [53] R. FLETCHER, V. M. PUDALOV, A. D. B. RADCLIFFE, et C. POSSANZINI. Critical behavior of thermopower and conductivity at the metal-insulator transition in high-mobility Si-MOSFET's. *Semicond. Sci. Tech.*, **16**, 386–393, 2001.
- [54] K. FRAHM, A. MÜLLER-GROELING, et J.-L. PICHARD. Effective  $\sigma$  model formulation for two interacting electrons in a disordered metal. *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 1509–1512, 1996.
- [55] K. FUCHS. *Proc. Roy. Soc. London*, **A 151**, 585, 1935.
- [56] M. GELL-MANN et K.A. BRUECKNER. Correlation Energy of an Electron Gas at High Density. *Phys. Rev.*, **106**, 364, 1957.
- [57] L.P. GOR'KOV et G. M. ELIASHBERG. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, **48**, 1407, 1965.
- [58] C.C. GRIMES et G. ADAMS. *Phys. Rev. Lett.*, **36**, 145, 1976.
- [59] F. D. M. HALDANE et E.H. REZAYI. Finite size scaling of the incompressible state of the fractionnaly quantized hall effect and its excitations. *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 237–240, 1985.
- [60] B.I. HALPERIN. Calculation of the fractional quantized hall effect. *Surf. Sci.*, **170**, 115–124, 1986.
- [61] B.I. HALPERIN et D.R. NELSON. Theory of two-dimensional Melting. *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 121, 1978.
- [62] Y. HANEIN, U. MEIRAV, D. SHAHAR, C.C. LI, D. C. TSUI, et H. SHTRIKMAN. The Metallic like Conductivity of a Two-Dimensional Hole System. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1288–1291, 1998.
- [63] Y. HANEIN, N. NENADOVIC, D. SHAHAR, H. SHTRIKMAN, C.C. YOON, J.AND LI, et D. C. TSUI. Linking insulator-to-metal transitions at zero and finite magnetic fields. *Nature*, **400**, 735–737, 1999.
- [64] Y. HANEIN, D. SHAHAR, C.C. YOON, J.AND LI, D. C. TSUI, et H. SHTRIKMAN. Observation of the metal-insulator transition in two-dimensional n-type GaAs. *Phys. Rev. B*, **58**, R13338–RR13340, 1998.
- [65] A.F. HEBARD et M.A. PAALANEN. Magnetic-Field-tuned Superconductor-Insulator Transition in two-dimensional Films. *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 927, 1990.
- [66] R. HEEMSKERK et T.M. KLAPWIJK. Nonlinear resistivity at the metal-insulator transition in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **58**, R1754–R1757, 1998.

- [67] S. ILANI, A. YACOBY, D. MAHALU, et H.. SHTRIKMAN. Unexpected Behavior of the local Compressibility near the  $B = 0$  Metal-Insulator Transition. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 3133, 2000.
- [68] S. ILANI, A. YACOBY, D. MAHALU, et H.. SHTRIKMAN. Microscopic structure of the metal-insulator transition in two dimensions. *Science*, **292**, 1354, 2001.
- [69] Y. IMRY et S. K. MA. Random-Field Instability of the ordered State of Continuous Symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1399, 1975.
- [70] M.J. KELLY et W. HANKE. *Phys. Rev. B*, **23**, 112, 1981.
- [71] W. KOHN. Theory of the Insulating State. *Phys. Rev.*, **133**, A171–A181, 1964.
- [72] J.M. KOSTERLITZ et D.J. THOULESS. Ordering metastability and phase Transition in two-dimensional systems. *J. Phys. C*, **6**, 1181, 1973.
- [73] R. KOTLYAR, C.A. STAFFORD, et S. DAS SARMA. *Phys. Rev.*, **133**, A171–A181, 1964.
- [74] A.A. KOULAKOV et B.L. SHKLOVSKII. Charging Spectrum and Configurations of a Wigner Crystal Island. *condmat/9707204*, 1997.
- [75] S.V. KRAVCHENKO, G.V. KRAVCHENKO, J.E. FURNEAU, V.M. PUDALOV, et M. D'IO-  
RIO. Possible metal-insulator transition at  $B = 0$  in two-dimension. *Phys. Rev. B*, **50**, 8039–8042, 1994.
- [76] S.V. KRAVCHENKO, W.E. MASON, G.E. BOWKER, J.E. FURNEAU, V.M. PUDALOV,  
et M. D'IORIO. Possible metal-insulator transition at  $B = 0$  in two-dimension. *Phys.  
Rev. B*, **51**, 7038–7045, 1995.
- [77] S.V. KRAVCHENKO, D. SIMONIAN, M.P. SARACHIK, W.. MASON, W.E. BOWKER, et  
J.E. FURNEAU. Electric Field Scaling at a  $B = 0$  Metal-Insulator in Two Dimensions.  
*Phys. Rev. Lett.*, **77**, 4938–4941, 1996.
- [78] J. LAM, M. D'IORIO, D. BROWN, et H. LAFONTAINE. Scaling and the metal-insulator  
transition in Si/SiGe quantum wells. *Phys. Rev. B*, **56**, R12741–R12743, 1997.
- [79] A.I. LARKIN et YU.N. OVCHINNIKOV. Pinning in Type II Superconductors. *Journ.Low  
Temp. Phys.*, **34**, 409–428, 1979.
- [80] R.B. LAUGHLIN. Anomalous Quantum Hall Effect :An Incompressible Quantum Fluid  
with Fractionally Charged Excitations. *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1395–1398, 1983.
- [81] R.B. LAUGHLIN. Quantized motion of three two-dimensional electrons in a strong  
magnetic field. *Phys. Rev. B*, **27**, 3383, 1983.
- [82] M. LEADBEATER, R.A. RÖMER, et M. SCHREIBER. Interaction-dependent enhance-  
ment of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random  
potential. *Eur. Phys. J. B.*, 1999.
- [83] A. J. LEGETT. Dephasing and non-dephasing collisions in nanostructures. pages 297–  
311, 1991. Granular electronic, D.K. Ferry editor Plenum Press.
- [84] A. LEWALLE, M. PEPPER, C.J.B FORD, E.H. HWANG, S. DAS SARMA, D.J. PAUL,  
et G. REDMOND. The relative importance of electron-electron interaction compared to  
disorder in the two-dimensional 'metallic' state. *cond-mat/0108244*.

- [85] F. LINDEMANN. *Z. Phys.*, **11**, 609, 1910.
- [86] Y. LIU, K.A. MCGREER, B. NEASE, D.B. HAVILAND, G. MARTINEZ, J.W. HALLEY, et A.M. GOLDMAN. Scaling of the Insulator-to-Superconductor Transition in Ultrathin Amorphous Bi Films. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 2068, 1991.
- [87] D. LOSS et P. GOLDBART. Period and amplitude halving in mesoscopic rings with spin. *Phys. Rev. B*, **43**, 13762, 1991.
- [88] YU.E. LOZOVIK et V.I. YUDSON. Crystallization of a two-dimensional electron gas in a magnetic field. *JETP Lett.*, **22**, 11, 1975.
- [89] J.-M. LUCK. *Systèmes désordonnés unidimensionnels*. Aléa-Saclay, Gif-sur-Yvette, 1992.
- [90] J.M. LUTTINGER. An exactly soluble Model of a Many-Fermions System. *J. Math. Phys.*, **4**, 1154, 1963.
- [91] G.D. MAHAN. *Many-Particle Physics*. Plenum Press, New-York and London, 1993.
- [92] M. L. MEHTA. *Random matrices*. Academic Press, New-York, 2nd edition, 1991.
- [93] Y. MEIR. Percolation-type description of the metal-insulator transition in two dimensions. 1999. cond-mat/9904361.
- [94] N.D. MERMIN et H. WAGNER. Absence of ferromagnetism and antiferromagnetism in one-or two- dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133–1136, 1966.
- [95] K.M. MERTES, D. SIMONIAN, M.P. SARACHIK, S.V. KRAVCHENKO, et T.M. KLAPWIJK. Respond to Parallel Magnetic Field of a Dilute 2D Electron System across the Metal-Insulator Transition. *Phys. Rev. B*, **60**, R5093–R5096, 1999.
- [96] A. MESSIAH. *Mécanique Quantique*. Dunod, Paris, 2nd edition, 1965. Tomes 1 et 2.
- [97] A.P. MILLS, A.P. RAMIREZ, X.P.A. GAO, L.N. PFEIFFER, K.W. WEST, et S.H. SIMON. Suppression of weak localisation effects in low-density metallic 2D holes. *cond-mat/0101020*, 2001.
- [98] G. MONTAMBAUX. Spectral fluctuations in disordered metals. Dans S. GIACOBINO, S. REYNAUD, et J. ZINN-JUSTIN, éditeurs, *Quantum Fluctuations*, Les Houches Session LXIII. Elsevier, Amsterdam, 1995.
- [99] P. NOZIÈRES et J.M. LUTTINGER. Dérivation of the Landau Theory of Fermi Liquids. *Phys. Rev.*, **127**, 1423,1421, 1962. série de deux articles notés I et II.
- [100] T. OKAMOTO, K. HOSOYA, S. KAWAJI, et A. YAGI. Spin Degree of Freedom in a two-Dimensional Electron Liquid. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 3875–3878, 1999.
- [101] S.J. PAPADAKIS, E.P. DE POORTERE, M. SHAYEGAN, et R. WINKLER. Anisotropic Magnetoresistance of Two-Dimensional Holes in GaAs. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 5592–5595, 2000.
- [102] S.J. PAPADAKIS et M. SHAYEGAN. Apparent metallic behavior at  $B = 0$  of a two-dimensional electron system in AlAs. *Phys. Rev. B*, **57**, R15068–R15071, 1998.

- [103] R.E. PEIERLS. *Quantum THEORY OF SOLIDS*. Oxford University Press, Oxford, 1955.
- [104] P. PHILLIPS, Y. WAN, I. MARTIN, S. KNYSH, et D. DALIDOVICH. Superconductivity in a two-dimensional electron gas. *Nature*, **395**, 253–257, 1998.
- [105] F. G. PIKUS et A. L. EFROS. New quantum Monte-Carlo method for strongly correlated systems. Quantum melting. *Solid State Comm.*, **92**, 485–488, 1994.
- [106] D PINES et NOZIERES. *The Theory of Fermi Liquids I*. Benjamin, New-York, 1966.
- [107] I. V. PONOMAREV et P. G. SILVESTROV. Coherent propagation of interacting particles in a random potential : the mechanism of enhancement. *Phys. Rev. B*, **56**, 3742–3759, 1997.
- [108] D. POPOVIC, A. B. FOWLER, et S. WASHBURN. Metal-Insulator Transition in a Low-Mobility Two-Dimension : Effects of Disorder and Magnetic Field. *Phys. Rev. Lett*, **79**, 1543–1546, 1997.
- [109] Y.Y. PROSKURYAKOV, A K SAVCHKO, S.S. SAFONOV, M. PEPPER, M.Y. SIMMONS, et D.A. RITCHIE. Fermi-liquid behaviour of the low-density 2D hole gas in GaAS/AlGaAs heterostructure at large values of  $r_s$ . *Phys. Rev. Lett*, **86**, 4895, 2001.
- [110] V.M. PUDALOV, G. BRUNTHALER, A. PRINZ, et G. BAUER. Instability of the two-Dimensional metallic phase to a parallel magnetic field. *JETP Lett.*, **65**, 932–937, 1997.
- [111] V.M. PUDALOV, M. D’IORIO, S.V. KRAVCHENKO, et J.W. CAMBELL. Zero-Magnetic-Field Collective Insulator Phase in a Dilute 2D Electron System. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 1866–1869, 1993.
- [112] V.M. PUDALOV, M. GERSHENSON, H. KOJIMA, N. BUTCH, E.M. DIZUR, G. BRUNTHALER, A. PRINZ, et G. BAUER. The low-density spin susceptibility and effective mass of mobile electrons in Si inversion layers. *condmat/0105081*, 2001.
- [113] F. RAPISARDA et G. SENATORE. Diffusion Monte Carlo Study of Electrons in Two-dimensional Layers. *Aust. J. Phys.*, **49**, 161, 1996.
- [114] M. (EDITOR) RASETTI. *The Hubbard Model, Recent Results*. 1991. World Scientific.
- [115] M. REZNIKOV, O. PRUS, Y. YAISH, et V. SIVAN, U. PUDALOV. In-plane Magnetization of Electrons in a Silicon Inversion Layer. Dans *Electronic Correlations :From Meso-to Nano-Physics*, volume XXXVI th Rencontres de Moriond, pages 201–206, 2001. T. Martin, G. Montambaux et J. Tran Thanh Van Editors, EDP Sciences.
- [116] M. ROGER. Multiple exchange in  $^3\text{He}$  and in the Wigner solid. *Phys. Rev. B.*, **30**, 6432, 1984.
- [117] M.P. SARACHIK. Metal-Insulator Transitions in Interacting Disordered Systems. Dans R.N. BHATT et N.P. ONG, éditeurs, *More is Different : Fifty years of Condensed Matter Physics*. Princeton University Press, 2000.
- [118] R.T. SCALETTAR, G.G. BATROUNI, A.P. KAMPF, et G.T. ZIMANYI. Simultaneous diagonal and off-diagonal order in the Bose-Hubbard Hamiltonian. *Phys. Rev. B*, **51**, 8467–8480, 1995.

- [119] J.H. SCHON, S. BERG, CH. KLOC, et B. BATLLOG. Ambipolar Pentracene Field-Effect Transistors and inverters. *Science*, **287**, 1022, 2000.
- [120] J.H. SCHON, CH. KLOC, et B. BATLLOG. Fractional quantum hall Effect in organic Molecular semiconductors. *Science*, **288**, 2338, 2000.
- [121] J.H. SCHON, CH. KLOC, et B. BATLOGG. Superconductivity in molecular crystals induced by charge injection. *Letters to Nature*, **406**, 702, 2000.
- [122] F. SELVA et J.-L. PICHARD. Coulomb repulsion versus Hubbard repulsion in a disordered chain. *Eur. Phys. J. B.*, **20**, 441–449, 2001.
- [123] V. SENZ, T. HEINZEL, T. IHN, K. ENSSLIN, G. DEHLINGER, D. GRUNTZMACHER, et U. GENNSER. Coexistence of weak localization and a metallic phase in Si/SiGe quantum wells. *Phys. Rev. B*, **61**, R5082, 2000.
- [124] V. SENZ, T. IHN, T. HEINZEL, K. ENSSLIN, G. DEHLINGER, D. GRUNTZMACHER, et U. GENNSER. Analysis of the Metallic Phase of Two-Dimensional Holes in SiGe in Terms of Temperature Dependent Screening. *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 4357, 2000.
- [125] R. SHANKAR. RG approach to interacting fermions. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 129, 1994.
- [126] A.A. SHASHKIN, S. V. KRAVCHENKO, V. T. DOLGOPOLOV, et T. M. KLAPWIJK. Indication of the ferromagnetic instability in a dilute two-dimensional electron system. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 086801, 2001.
- [127] A.A. SHASHKIN, S. V. KRAVCHENKO, et T. M. KLAPWIJK. Metal-insulator transition in a 2D electron gas : Equivalence of two approaches for determining the critical point. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 266402, 2001.
- [128] A.A. SHASKIN, A.V. KRAVCHENKO, V.T. DOLGOPOLOV, et T.M. KLAPWIJK. Indication of the Ferromagnetic Instability in a dilute two-dimensional electron system. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 086801, 2001.
- [129] A.A. SHASKIN, A.V. KRAVCHENKO, et T.M. KLAPWIJK. Metal-insulator transition in a 2D electron gas : Equivalence of two approaches for determining the critical point. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 266402, 2001.
- [130] D L SHEPELYANSKY. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 2607–2610, 1994.
- [131] D L SHEPELYANSKY et P.H. SONG. Quantum ergodicity for electrons in two dimensions. *Ann. Phys. (Leipzig)*, **8**, 665, 1999.
- [132] B I. SHKLOVSKII, B. SHAPIRO, B R. SEARS, P. LAMBRIANIDES, et H B. SHORE. Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, **47**, 11487–11490, 1993.
- [133] P. G. SILVESTROV. Decay of a Quasiparticle in a Quantum Dot : The Role of Energy Resolution. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3994–3997, 1997.
- [134] M.Y. SIMMONS, A.R. HAMILTON, M. PEPPER, E.H. LINFIELD, et D.A. ROSE, P.D. RITCHIE. Weak Localization Hole-Hole Interactions and the Metal-Insulator Transition in Two-Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 2489–2492, 2000.

- [135] M.Y. SIMMONS, A.R. HAMILTON, M. PEPPER, E.H. LINFIELD, D.A. ROSE, P.D. RITCHIE, A.K. SAVCHENKO, et T.G. GRIFFITHS. Metal-insulator transition at  $B = 0$  in a Dilute Two-Dimensional GaAs-AlGaAs Hole Gas. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1292–1295, 1998.
- [136] D. SIMONIAN, S. V. KRAVCHENKO, et M.P. SARACHIK. Reflexion symmetry at a  $B = 0$  metal-insulator transition in two dimensions. *Phys. Rev. B*, **55**, R13421–R13423, 1997.
- [137] D. SIMONIAN, S. V. KRAVCHENKO, M.P. SARACHIK, et PUDALOV.V.M. Magnetic Field Suppression of the Conducting Phase in Two-Dimension. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 2304–2307, 1997.
- [138] S.L. SONDHI, S.M. GIRVIN, J.P. CARINI, et D. SHAHAR. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, **69**, 315–333, 1997. RMP Colloquia.
- [139] P H SONG et F VON OPPEN. General localization lengths for two interacting particles in a disordered chain. *Phys. Rev. B*, **59**, 46–49, 1999.
- [140] C.A. STAFFORD, A.J. MILLIS, et B.S. SHASTRY. *Phys. Rev. B*, **43**, 13660, 1991.
- [141] D.R. STEWART, D. SPRINZAK, C.M. MARCUS, C.I. DURUOZ, et J.S. HARRIS JR. Correlations between Ground and Excited State Spectra of a Quantum Dot. *Science*, **278**, 1784, 1997.
- [142] J.S. TAKUR et D. NEILSON. *Phys. Rev. B*, **58**, 13717, 1998.
- [143] B. TANATAR et D.M. CEPERLEY. Ground state of the two dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **39**, 5005–5016, 1989.
- [144] D J THOULESS. Exchange in solid  $^3\text{He}$  and the Heisenberg hamiltonian. *Proc. Phys. Soc. London*, **86**, 893–904, 1965.
- [145] D J THOULESS. Maximum metallic resistance in thin wires. *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 1167–1169, 1977.
- [146] E.V. TSIPER et A.L. EFROS. Structural and insulator-metal quantum phase transitions on a lattice. *Phys. Rev. B*, **57**, 6949, 1998.
- [147] S.A. VITKALOV, H. ZHENG, K.M. MERTES, M.P. SARACHIK, et T.M. KLAPWIJK. Small-Angle Shubnikov-de Haas Measurements in a 2D Electron System : The Effect of a Strong In-Plane Magnetic Field. *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 2164–2167, 2000.
- [148] S.A. VITKALOV, H. ZHENG, K.M. MERTES, M.P. SARACHIK, et T.M. KLAPWIJK. Scaling of the Magnetoconductivity of Silicon MOSFETs : Evidence for a Quantum Phase Transition in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 086401, 2001.
- [149] F. VON OPPEN et T. WETTIG. Interaction-induced delocalization of quasiparticles pairs in the Anderson insulator. *Europhys. Lett.*, **32**, 741–746, 1995.
- [150] X. WAIN TAL. *Effet de l'interaction Coulombienne sur la localisation d'Anderson dans des systèmes de basse dimensions*. 1998. thèse de l'école polytechnique.
- [151] X. WAIN TAL et J.-L. PICHARD. Two interacting particles in a disordered chain I : Multifractality of the interaction matrix elements. *Phys. J. B.*, **6**, 451–456, 1998.

- [152] X. WAIN TAL, D. WEINMANN, et J.-L. PICHARD. Two interacting particles in a disordered chain II : Critical statistics and maximum mixing of the one body states. *Phys. J. B.*, **7**, 117–121, 1999.
- [153] D. WEINMANN, A. MÜLLER-GROELING, J.-L. PICHARD, et K. FRAHM.  $h/2e$  oscillations for correlated electron pairs in disordered mesoscopic rings. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 1598–1601, 1995.
- [154] D. WEINMANN et J.-L. PICHARD. Level Statistics and Localization for Two Interacting Particles in a Random Potential. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 1556–1559, 1996.
- [155] D. WEINMANN, J.-L. PICHARD, et Y. IMRY. Thouless numbers for few-particle systems with disorder and interactions. *J. Phys. I France*, **7**, 1559–1581, 1997.
- [156] E. WIGNER. On the Interaction of Electrons in Metals. *Phys. Rev.*, **46**, 1002–1011, 1934.
- [157] E.P. WIGNER. *Ann. Math.*, **53**, 36, 1951.
- [158] K.G. IN WILSON. *Nobel Symposia-Medicine and Natural Sciences*. Academic Press, New York, 1973. eds Lundqvist B. and S. p. 68.
- [159] J. YOON, C.C. LI, D. SHAHAR, D.C. TSUI, et M SHAYEGAN. Wigner Crystallisation and Metal-Insulator Transition of Two-Dimensional Holes in GaAs at  $B = 0$ . *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 1744–1747, 1999.
- [160] J. YOON, C.C. LI, D. SHAHAR, D.C. TSUI, et M SHAYEGAN. Parallel Magnetic Field Induced Transition in Transport in the Dilute Two-Dimensional Hole System in GaAs. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 4421–4424, 2000.
- [161] N. YU et M. FOWLER. Persistent current of a Hubbard ring threaded with a magnetic flux. *Phys. Rev. B*, **45**, 11795–11804, 1992.